19-09-2023

1ª Aula

Estrutura atómica

1ª parte

- Estrutura do átomo
- Estrutura atómica e radiação eletromagnética.

2ª Parte

- Números quânticos e orbitais
- Relações periódicas entre elementos

Resumo

- Estrutura atómica
- Estrutura eletrónica do átomo de hidrogénio
- Orbitais atómicas e números quânticos
- Configuração eletrónica
- Princípio da exclusão de Pauli

Chang
Cap. 2 & Cap. 7

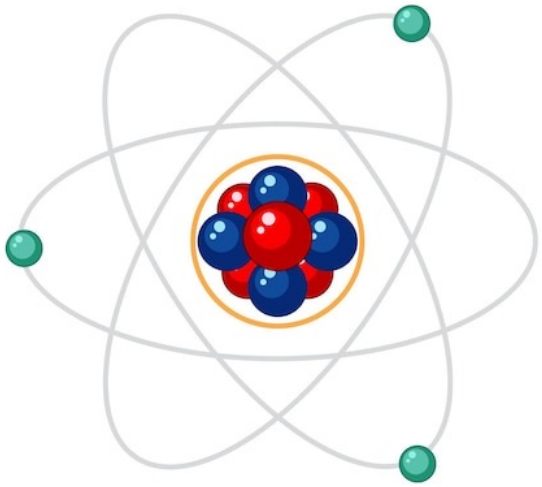
Atkins
Cap. 1

M K.C. Timberlake, M. Orgil, "General, Organic and Biological Chemistry (structures of life)" 6th ed., Pearson, 2021.

Cap. 4

"Neon light" is a generic term for atomic emission involving various noble gases, mercury, and phosphor. The UV light from excited mercury atoms causes phosphor-coated tubes to fluoresce white light and other colors.

Estrutura Atómica



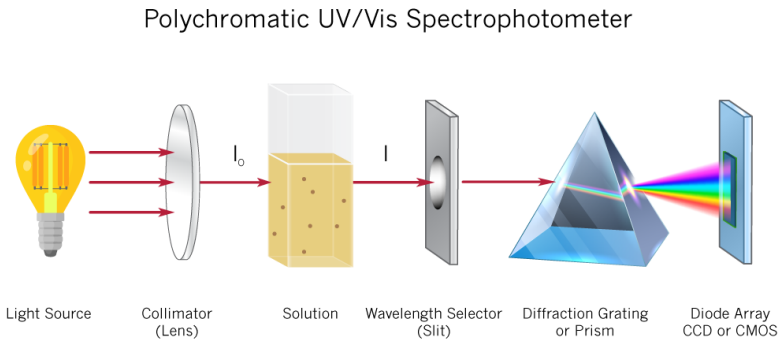
Dalton

Toda a matéria é constituída por

átomos: particular indevísivel

Átomo – a menor partícula que caracteriza ainda um elemento químico

Porque é importante conhecer a estrutura dos átomos ?

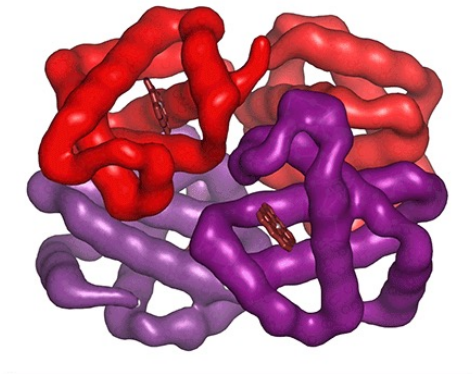


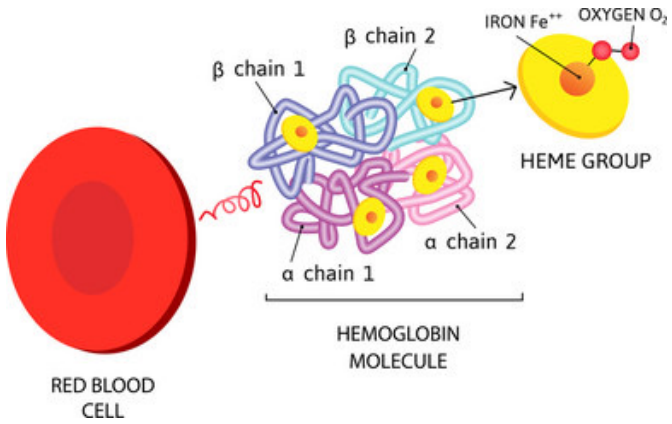
Os métodos de análise clinica baseiam-se no conhecimento da estrutura atómica dos elementos e como as propriedades elementares estão relacionados com o arranjo dos eletrões de um determinado átomo. O conhecimento da estrutura atómica permite por exemplo identificar substancias no sangue, incluindo oxigénio e nutrientes essenciais ainda que em valores muito baixos ou ainda elementos nocivos, indicando a existência de patologias (anemia deficiência de ferro,, envenenamento por níveis elevados de metais pesados (Cd, Pb) (fadiga e dores de cabeça).

Química da Vida

- Estrutura de biomoléculas e função

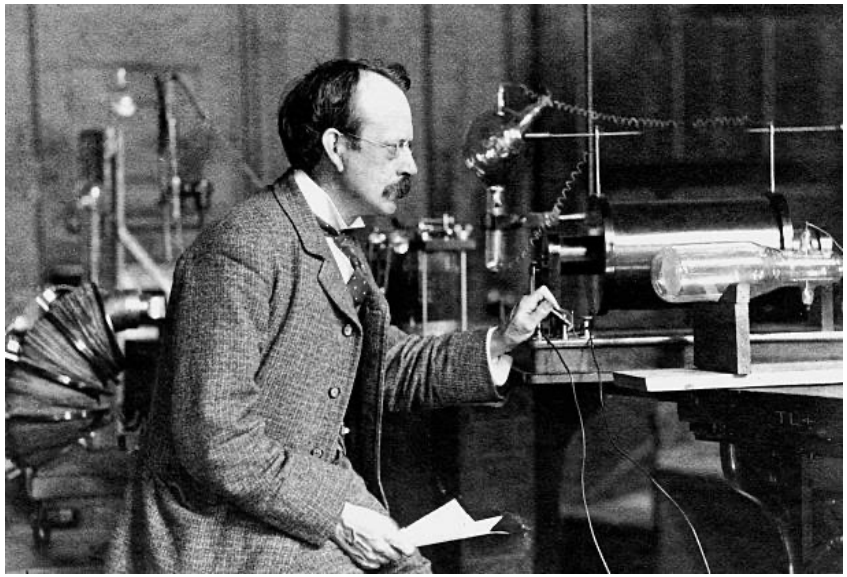
Átomos → Moléculas → Estruturas biológicas



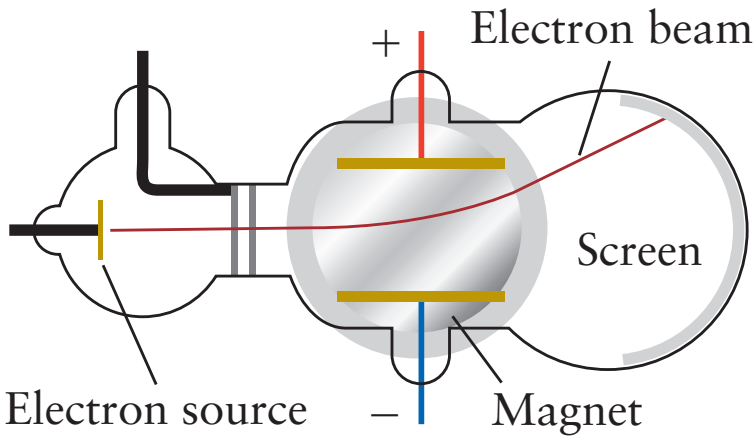


Estrutura do átomo

Experiencias Thomson (1856-1940)



Tubo de raios catódicos

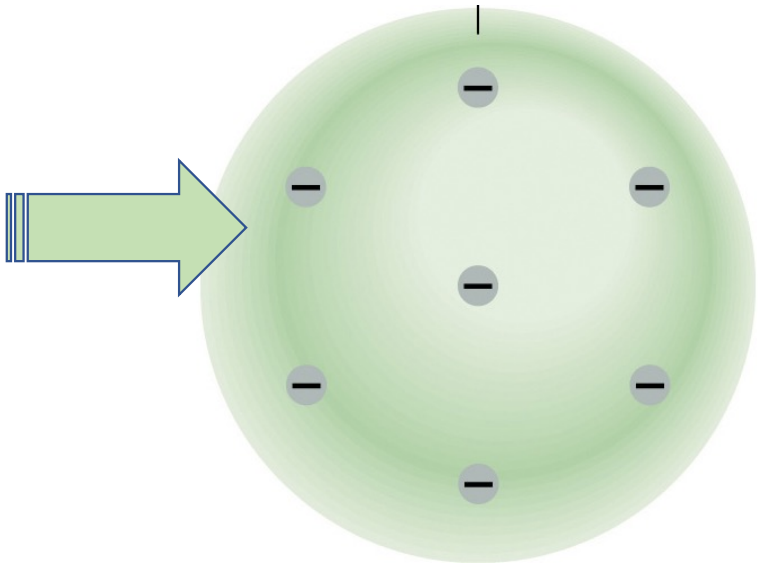


Estrutura do átomo

- O feixe é constituído por partículas de carga negativa-electrões.
- carga/massa = 1.76×10^8 C/g
- Como os átomos são neutros e existência de electrões implica a existência de partículas de carga positiva-protões

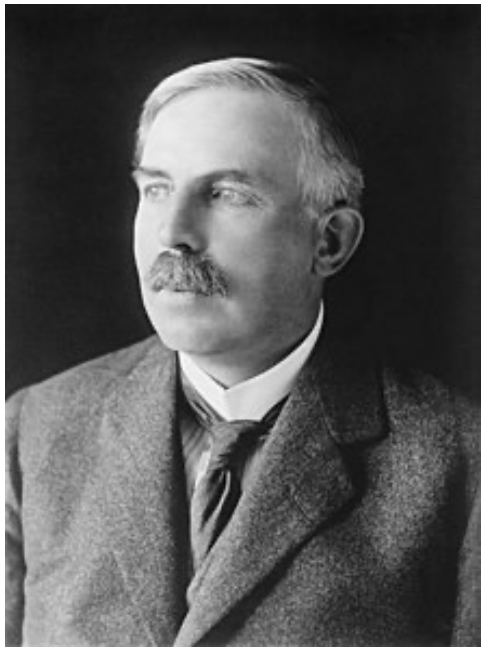
Modelo de Thomson
"Modelo do pudim de passas"

protões-pudim



Estrutura do átomo (cont.)

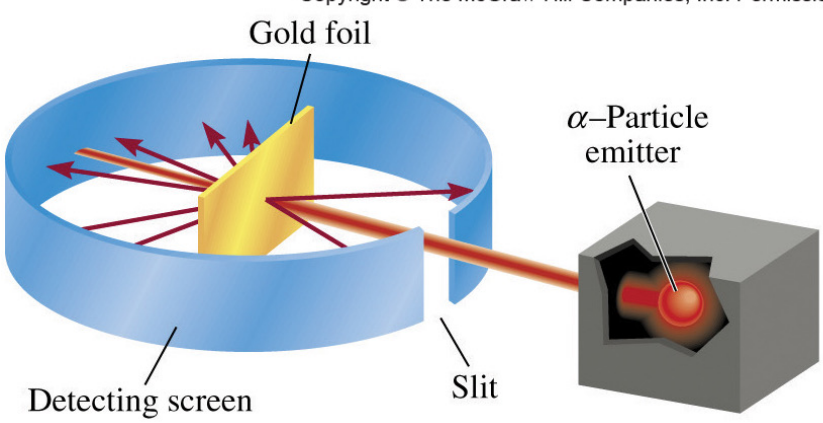
Experiências de Rutherford, Geiger e Mardsen



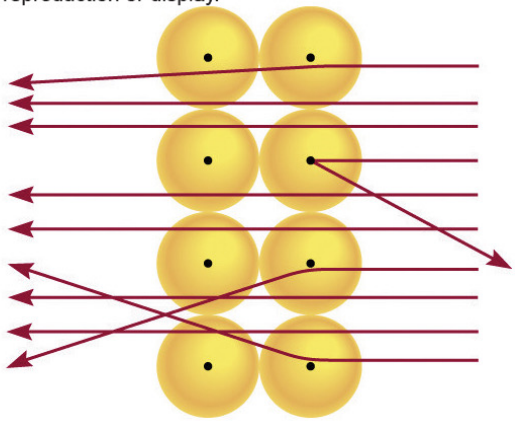
(1871-1937)

Particulas α –partículas carregadas positivamente

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



(a)



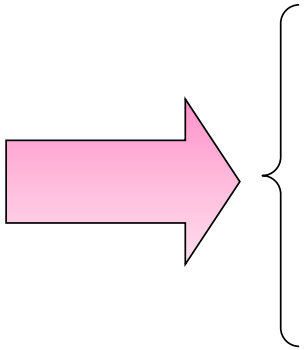
(b)

Os protões, partículas carregadas positivamente deveriam estar concentrados numa pequena região-núcleo

Estrutura do átomo (cont.)

Núcleo (com carga elétrica positiva)

Eletrões de carga negativa



protões (partículas positivas)
neutrões (partículas neutras)

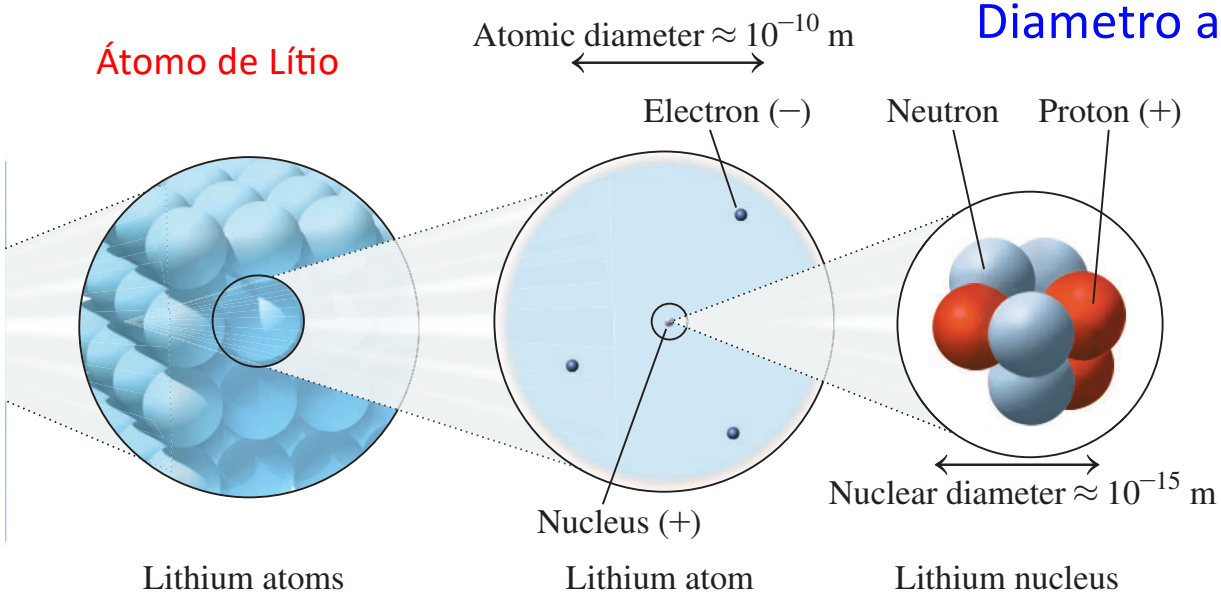
	símbolo	Carga/e	Massa (kg)	Massa (u)
eletrão	e^-	–1	$9{,}109 \times 10^{-31}$	$5{,}49 \times 10^{-4}$
protão	p, p^+, H^+	+1	$1{,}673 \times 10^{-27}$	1,0075
neutrão	n	0	$1{,}675 \times 10^{-27}$	1,0087

Carga elementar - $e = 1{,}6022 \times 10^{-19}$ C

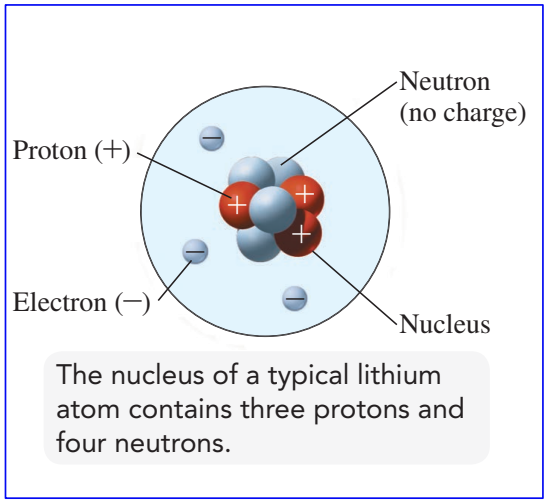
Constante fundamental eletromagnética igual à carga de um protão e usada como unidade atómica de carga

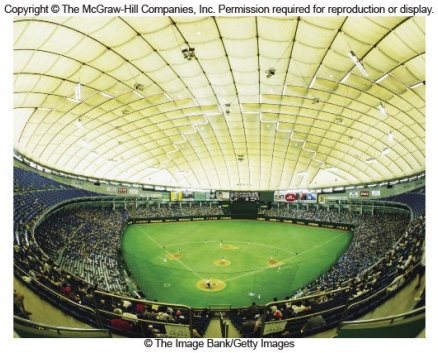
Estrutura do átomo (cont)

Átomo de Lítio



Diametro atómico 10^{-10} m

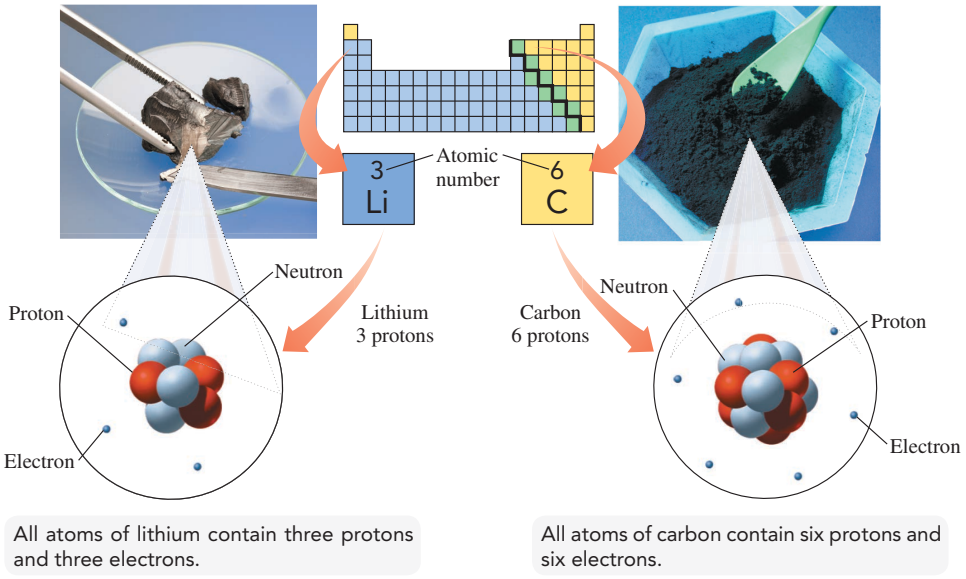




Diametro nuclear 10^{-15} m

Se um átomo por hipótese tivesse o tamanho de um estádio de football então o nucleo teria o tamanho de uma bola de golf no centro do estádio.

Número Atómico, Número de Massa



Número Atómico (Z) = Número de protões

Número de Massa (A) = Número de protões + Numero de de neutrões.

Lítio

Numero de neutrões = A-Z = 6-3=3

Carbono

Numero de neutrões = 12-6=6

Notação para um elemento X

$$ {}^{A}_{Z}X $$

Isótopos

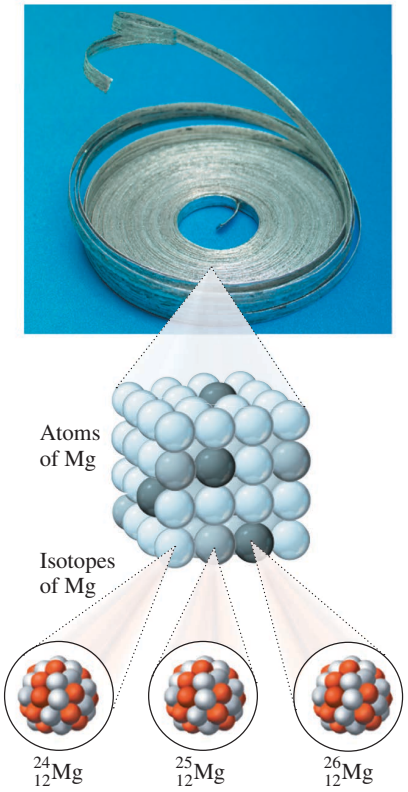


TABLE 4.7 Isotopes of Magnesium

Atomic Symbol	$^{24}_{12}$Mg	$^{25}_{12}$Mg	$^{26}_{12}$Mg
Name	Mg-24	Mg-25	Mg-26
Number of Protons	12	12	12
Number of Electrons	12	12	12
Mass Number	24	25	26
Number of Neutrons	12	13	14
Mass of Isotope (amu)	23.99	24.99	25.98
Percent Abundance	78.70	10.13	11.17

Isótopos de um elemento têm o mesmo número atómico mas número de massa diferente

Voltamos a este matéria quando falarmos de cinética Química

Radiação e estrutura atómica

Características da radiação eletromagnética

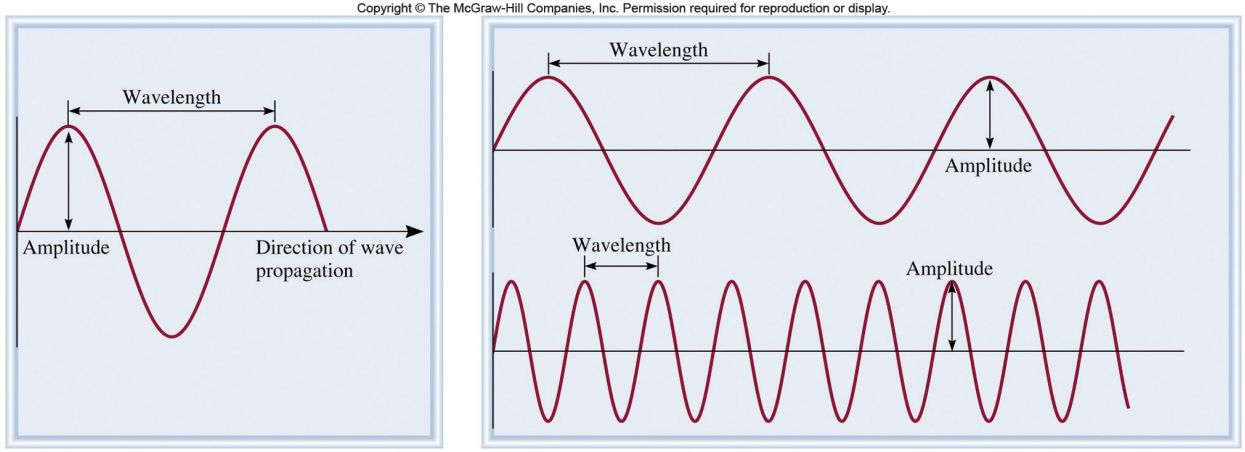
Radiação eletromagnética é a emissão e transmissão de energia sob a forma de ondas eletromagnéticas.

Maxwell (1863)

Qual a relação entre radiação eletromagnética e a estrutura atómica?

Radiação electromagnética

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

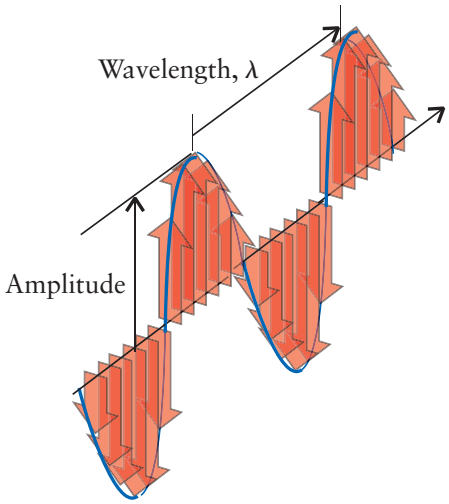


Comprimento de onda ***(λ)*** *é a distância entre pontos idênticos em ondas sucessivas.*

Amplitude *é a distância vertical entre a linha média de uma onda para o pico.*

Frequência *(ν) é o número de ondas que passam por determinado ponto em 1 segundo (Hz = 1 ciclo/s).*

Radiação eletromagnética



- Qualquer seja a radiação eletromagnética

$$\lambda \times \nu = c$$

- Velocidade da luz (c) no vácuo = 3.00×10^8 m/s

Espectro eletromagnético

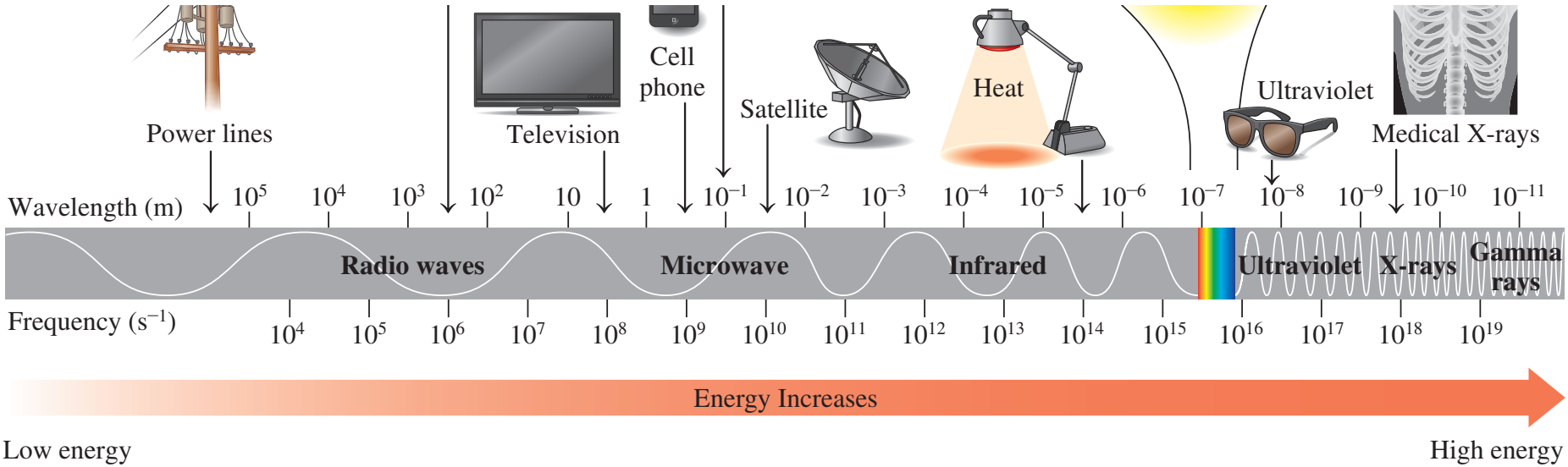


FIGURE 4.9 ▶ The electromagnetic spectrum shows the arrangement of wavelengths of electromagnetic radiation. The visible portion consists of wavelengths from 700 nm to 400 nm.

How does the wavelength of ultraviolet light compare to that of a microwave?

TABLE 1.1 Color, Frequency, and Wavelength of Electromagnetic Radiation

Radiation type	Frequency (10^{14} Hz)	Wavelength (nm, 2 sf)*	Energy per photon (10^{-19} J)
x-rays and γ-rays	$\geq 10^3$	≤ 3	$\geq 10^3$
ultraviolet	8.6	350	5.7
visible light			
violet	7.1	420	4.7
blue	6.4	470	4.2
green	5.7	530	3.8
yellow	5.2	580	3.4
orange	4.8	620	3.2
red	4.3	700	2.8
infrared	3.0	1000	2.0
microwaves and radio waves	$\leq 10^{-3}$	$\geq 3 \times 10^6$	$\leq 10^{-3}$

*The abbreviation sf denotes the number of significant figures in the data. The frequencies, wavelengths, and energies are typical values; they should not be regarded as precise.

Química & Saúde

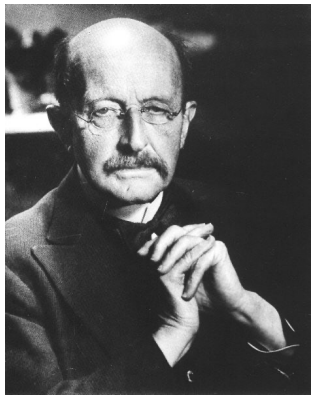
Chemistry Link to Health (*continued*)

Phototherapy is used to treat babies with neonatal jaundice.

In a disorder called *seasonal affective disorder*, or SAD, people experience mood swings and depression during the winter. Some research suggests that SAD is the result of a decrease in serotonin, or an increase in melatonin, when there are fewer hours of sunlight. One treatment for SAD is therapy using bright light provided by a lamp called a light box. A daily exposure to blue light (460 nm) for 30 to 60 min seems to reduce symptoms of SAD.

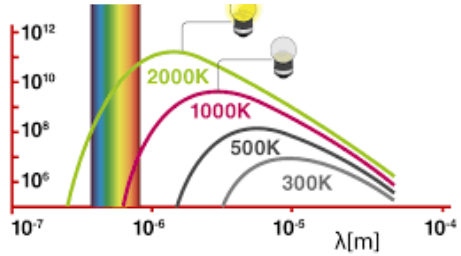
A light box is used to provide light, which reduces symptoms of SAD.

Quantificação da Energia-Quantum



Plank 1900

- Quando os sólidos são aquecidos, emitem radiação eletromagnética numa ampla gama de comprimentos de onda.
- A energia radiante emitida por um objeto a uma determinada temperatura depende do comprimento de onda.



- Os átomos e moléculas podem emitir (absorver) energia (E, radiação) em unidades discretas –quantum (n).

Energia da radiação eletromagética ⇒ $E = nh\frac{c}{\lambda}$

n-número inteiro

Constante de Planck (h) = 6.63 x 10^{-34} J•s

Dualidade Onda-partícula (L. De Broglie, 1924)

- Se as ondas se podem comportar como partículas, então as partículas podem ter propriedades ondulatórias.

Dualidade Onda-partícula (L. De Broglie)

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

v = velocidade da partícula *m* = massa da partícula

- A dualidade onda-partícula é uma característica universal de todos os corpos

Exemplo

1. Qual é o comprimento de onda De Broglie (em nm) associado com uma bola de pingue-pongue de 2.5 g, viajando a 15.6 m/s?

$\lambda = h/mv$ h em J•s m em kg v em (m/s)

$\lambda = 6.63 \times 10^{-34} / (2.5 \times 10^{-3} \times 15.6)$

$\lambda = 1.7 \times 10^{-32}$ m = 1.7×10^{-23} nm

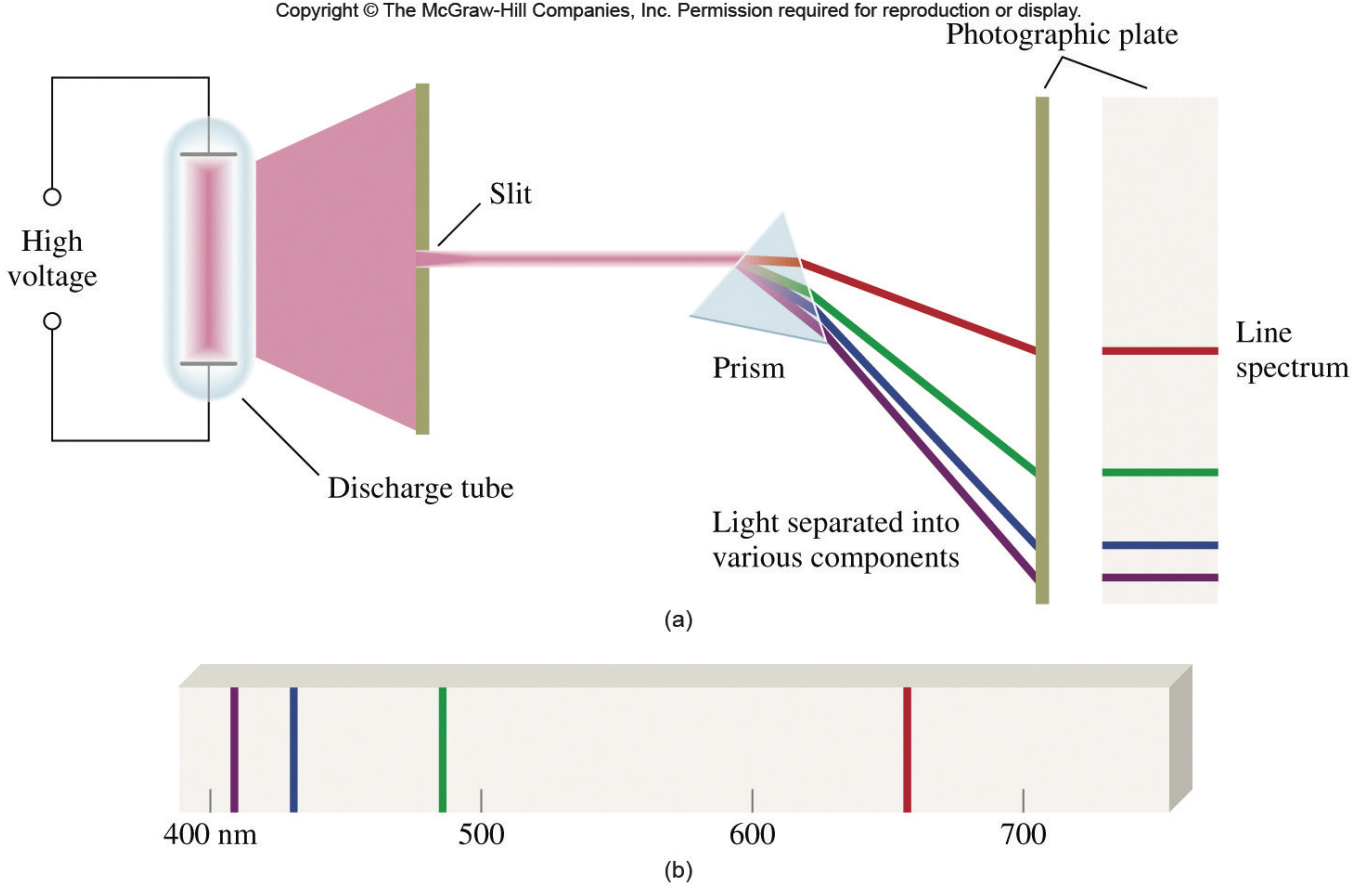
2. Qual é o comprimento de onda De Broglie (em nm) associado a um átomo de hidrogénio (massa = $1{,}674 \times 10^{-27}$ kg), que se move à velocidade de $7{,}00 \times 10^{2}$ cm/s ?

Estrutura Atómica

Números quânticos e orbitais

Espectro de Emissão do átomo de hidrogénio

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Espectro de Emissão do átomo de hidrogénio

Contrariamente à radiação visível, o espetro dos átomos isolados não é um continuo de comprimentos de onda, mas é caracterizado apenas por emissões a comprimentos de onda (λ) específicos.

Como é que o espectro se relaciona com a estrutura do átomo de hidrogénio ?

Teoria de Bohr (átomo de H)

Niels Bohr, 1913

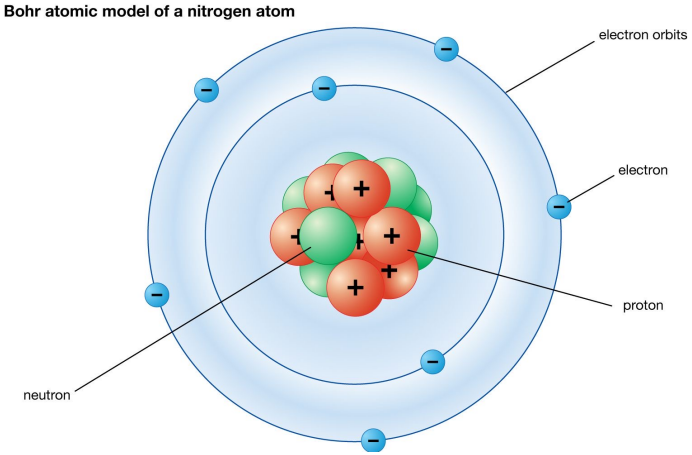
Os eletrões podem ter apenas valores específicos de energia (**quantizada**)

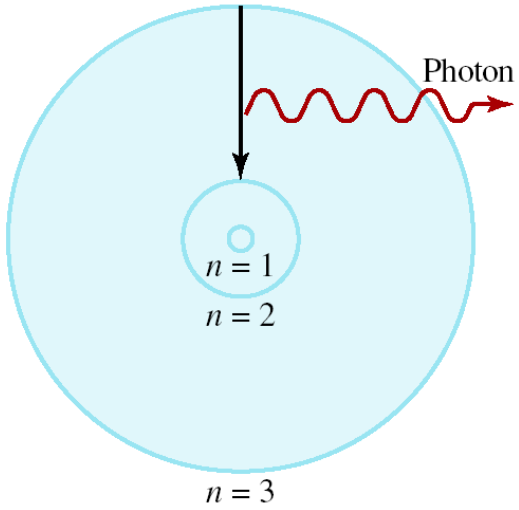
$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$ (ver próximo slide)

n (número quântico principal) = 1,2,3,…

R_H (constante de Rydberg) = 2.18 x 10^{-18}J

A quantização implica que apenas determinados estados de energia são permitidos





Nota

A equação A é um caso particular da Equação B que é valida para espécies hidrogenoide, sendo Z o número atómico

$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$ **A**

$E_n = - = -R_H \times Z^2 / n^2$ **B**

Modelo atómico de Bohr (1913)

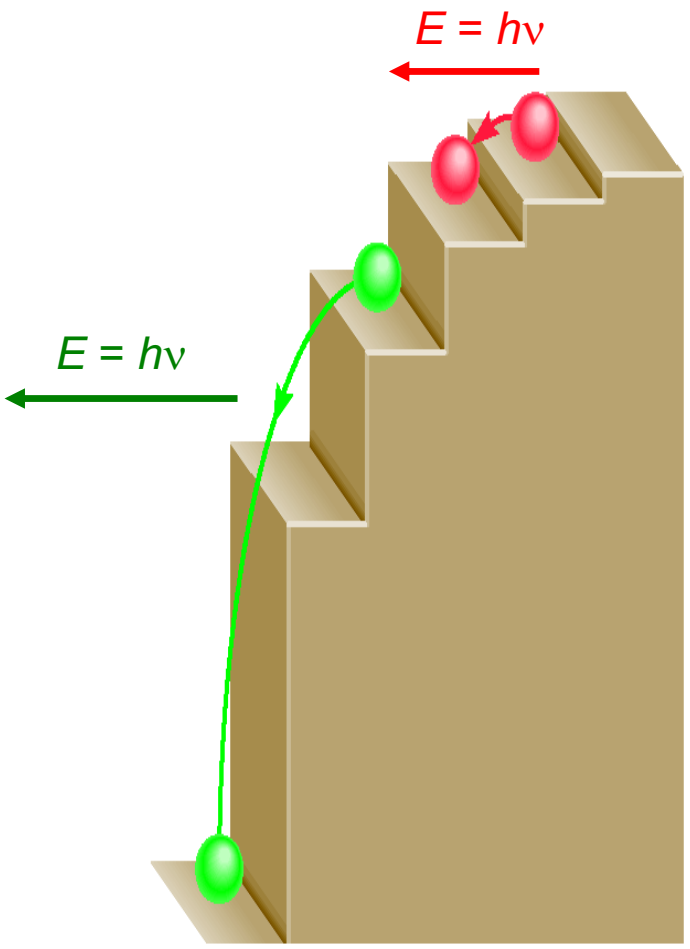
Quando um eletrão se move de um nível de energia para um nível inferior é **emitido** um fotão com a energia ΔE

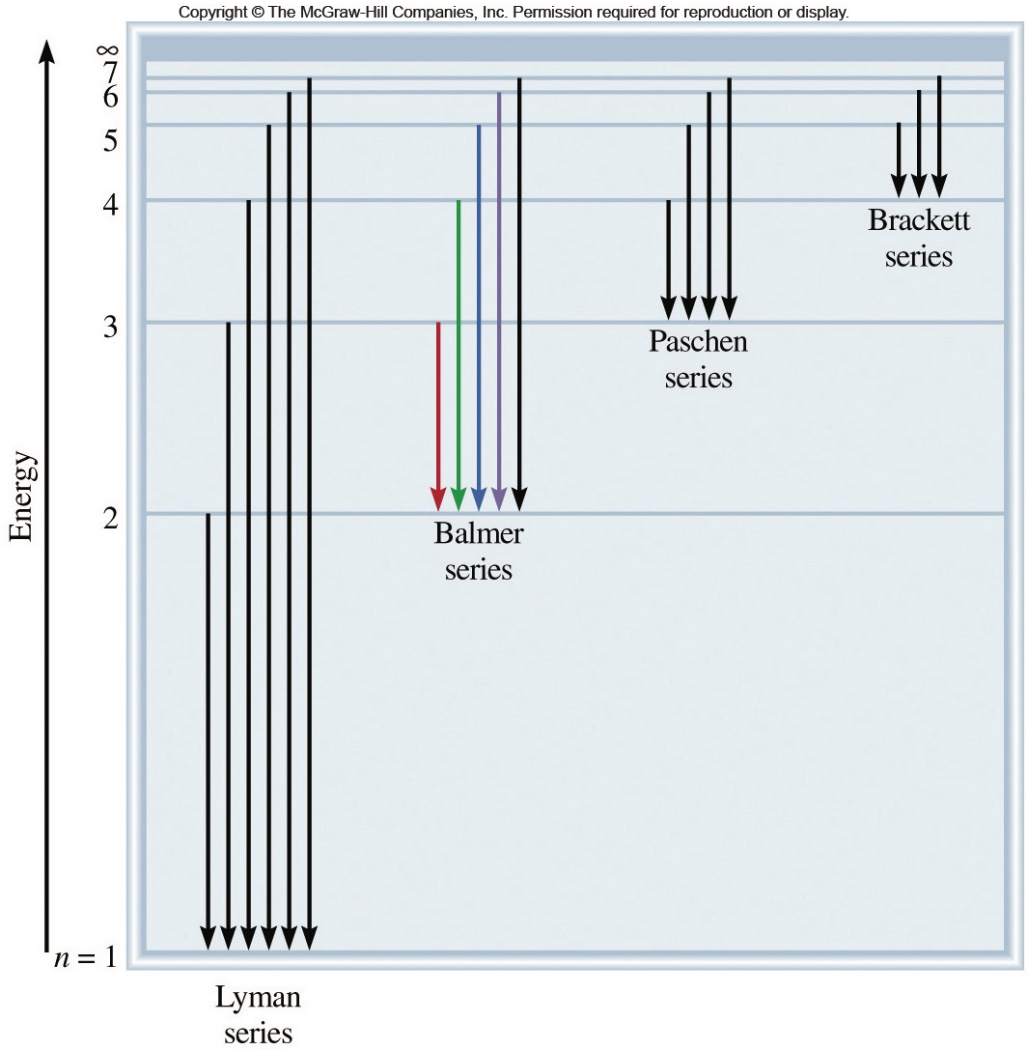
- Diferença de energia entre níveis

$$\Delta E_n = E_f - E_i$$

- Quando o eletrão passa para um nível mais elevado é **absorvido** um fotão.

Neste caso, $\Delta E_n > 0$





$E_{\text{fotão}} = \Delta E = E_f - E_i$

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n_i^2}\right)$$

$$E_n = -R_H \left(\frac{1}{n_f^2}\right)$$

R_H = constante de Rydberg
$R_H = 2{,}18 \times 10^{-18}$ J

$$\Delta E = -2{,}18x10^{-18} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Nota: o valor dá negativo porque ocorre emissão de energia

Resumo

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

TABLE 7.1 The Various Series in Atomic Hydrogen Emission Spectrum

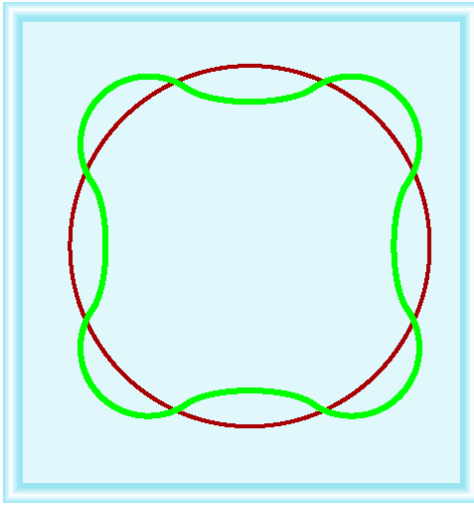
Series	n_f	n_i	Spectrum Region
Lyman	1	2, 3, 4, . . .	Ultraviolet
Balmer	2	3, 4, 5, . . .	Visible and ultraviolet
Paschen	3	4, 5, 6, . . .	Infrared
Brackett	4	5, 6, 7, . . .	Infrared

Princípio da Incerteza de Heisenberg

(W. Heisenberg, 1927)

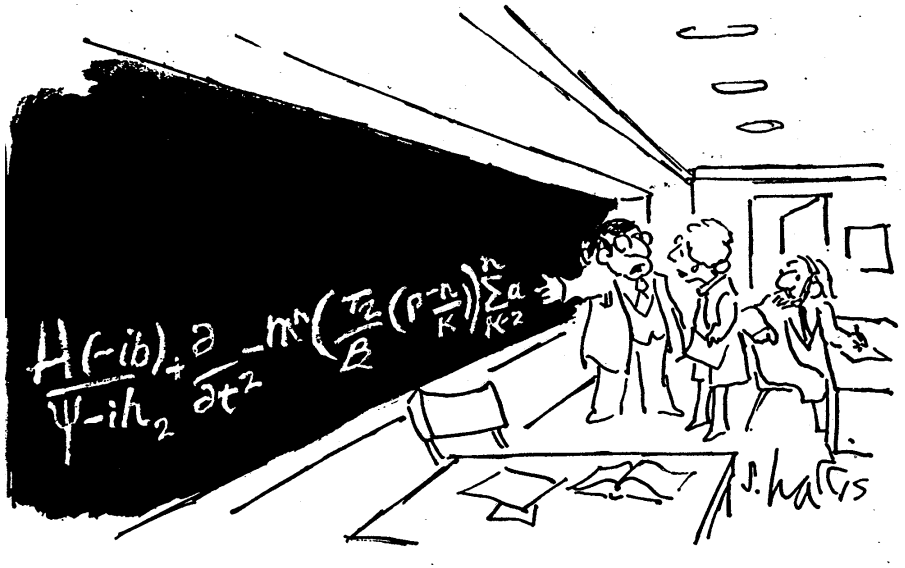
- O Modelo de Bohr apenas explica o espectro de emissão do átomo de H
- A descoberta das propriedades ondulatórias do eletrão levam a que não se possa definir com precisão a sua posição (uma onda estende-se no espaço)
- A incerteza relativamente à posição do eletrão significa que ele não se move com trajetória bem definida como postulado por Bohr.
- ***Princípio da incerteza de Heizenberg***: *não é possível conhecer simultaneamente e com precisão a posição* (Δx) *e o momento linear* (Δp) *(massa x velocidade) de uma partícula:*

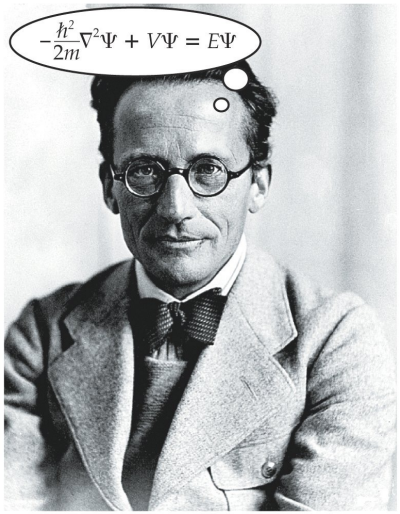
$$\Delta x.\Delta p \geq h/4\pi$$



Equação de onda de Schrödinger

Equação de onda de Schrödinger





Erwin Schrödinger
(1927)

"But this *is* the simplified version for the general public"

Equação de Schrödinger só pode ser resolvida de forma exata para o **átomo de hidrogénio**. Para átomos polieletrónicos só pode ser resolvida de forma aproximada.

Equação de onda de Schrödinger (cont.)

Equação de Schrödinger descreve o comportamento a energia das partículas sub-microscópicas tendo em conta o comportamento ondulatório e de partícula

$$H\,\psi = E\,\psi \quad \textit{(forma compacta)}$$

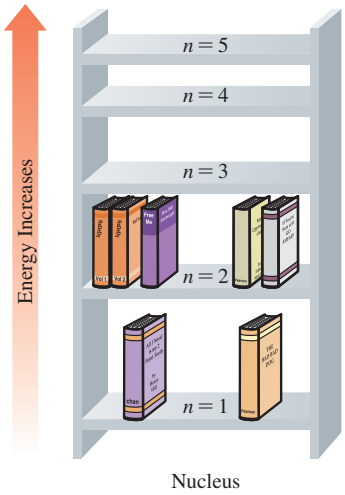
A Função de onda (ψ) Descreve:

- A energia de e^- com uma determinada função ψ
- **As funções de onda são expressões matematicas complexas resultantes da resolução da equação Schrödinger**
- A probabilidade de densidade eletrónica ψ^2 (densidade eletrónica), a probabilidade de encontrar o *e*- num determinada região do espaço (volume)

Nota: Partícula em sentido lato (átomo, molécula , eletrão, etc)

Resumo

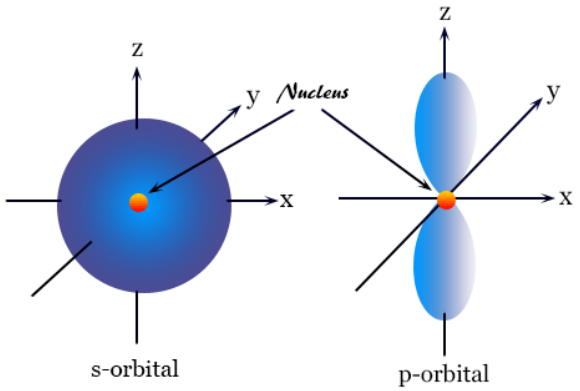
"The current understanding of the electronic structure of atoms is based on the *quantum mechanical model*, developed by Austrian physicist Erwin Schrödinger in 1926. One of the fundamental assumptions of the model is that electrons have both *particle-like and wave-like properties* and that the behaviour of electrons can *be described using a mathematical equation called a wave function*. One consequence of this assumption is that electrons are not perfectly free to move about in an atom. *Instead, each electron is restricted to a certain region of space within the atom, depending on the electron's energy level*. Different electrons have different amounts of energy and thus occupy different regions within the atom. Furthermore, the energies of electrons are *quantized* or restricted to having only a certain value"



An electron can have only the energy of one of the energy levels in an atom.

Orbitais atómicas & Números quânticos

- As funções de onda dos electrões nos átomos são designadas de orbitais. A cada orbital tem uma energia caraterística e uma distribuição da densidade eletrónica característica.

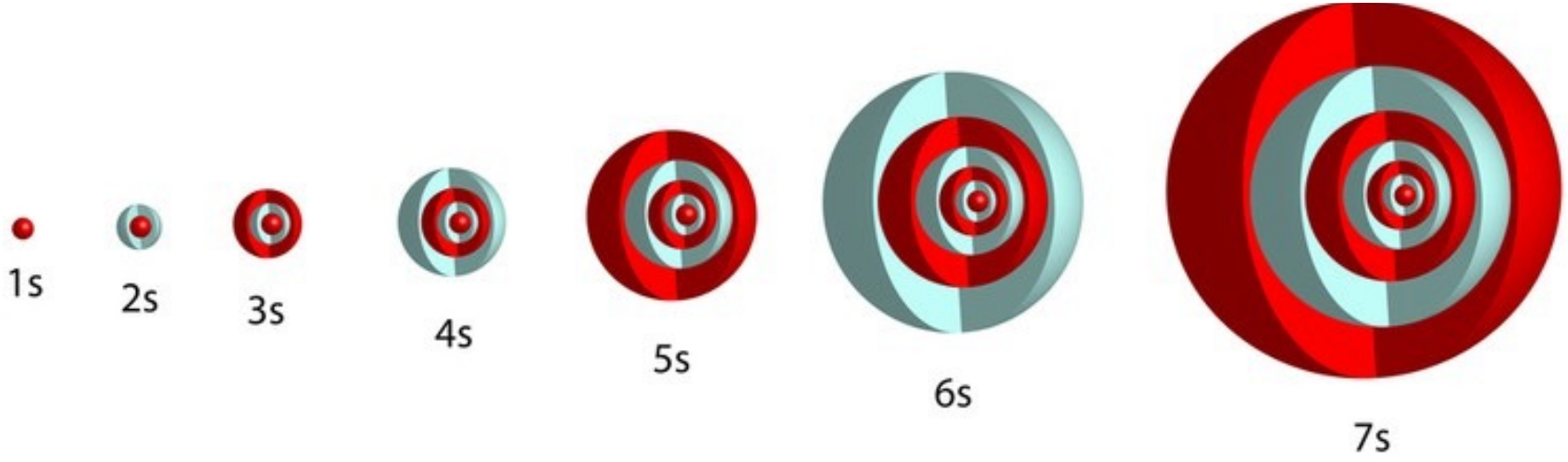


- A cada orbital atómica encontram-se associados três números quânticos n, l, and m_l : Estes números são obtidos da função de onda Ψ por resolução da equação de **Schrödinger** e descrevem a energia (n) os electrões nas orbitais (l) a orientação da orbital (m_l).

número quântico principal *n*

n = 1, 2, 3, 4, ….

o *n* aumenta com a distância média do eletrão ao núcleo



Orbital 1s do átomo de hidrogénio

- Embora não seja possível determinar com precisão a posição do eletrão, uma orbital define a região tridimensional de volume onde mais provável encontrar o eletrão.

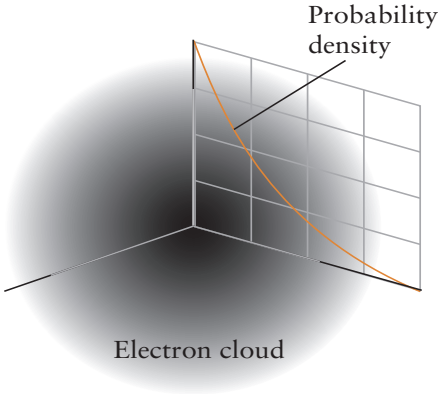
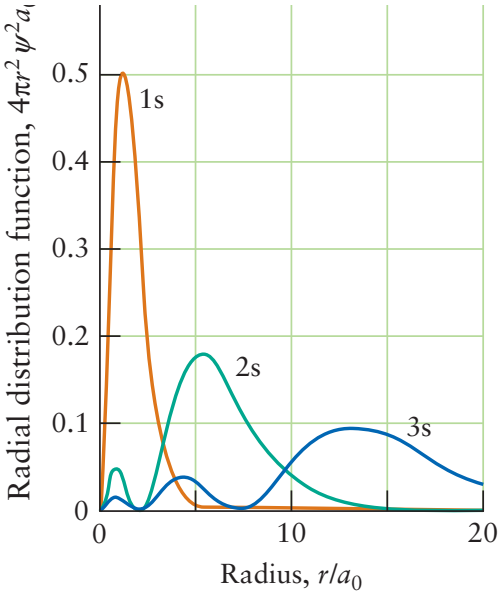
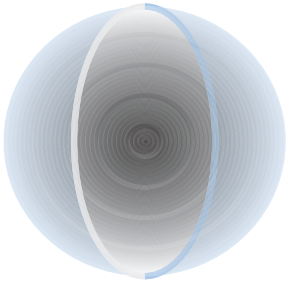


FIGURE 2.4 The three-dimensional electron cloud corresponding to an electron in a 1s-orbital of hydrogen. The density of shading represents the probability of finding the electron at any point. The superimposed graph shows how the probability varies with the distance of the point from the nucleus along any radius.



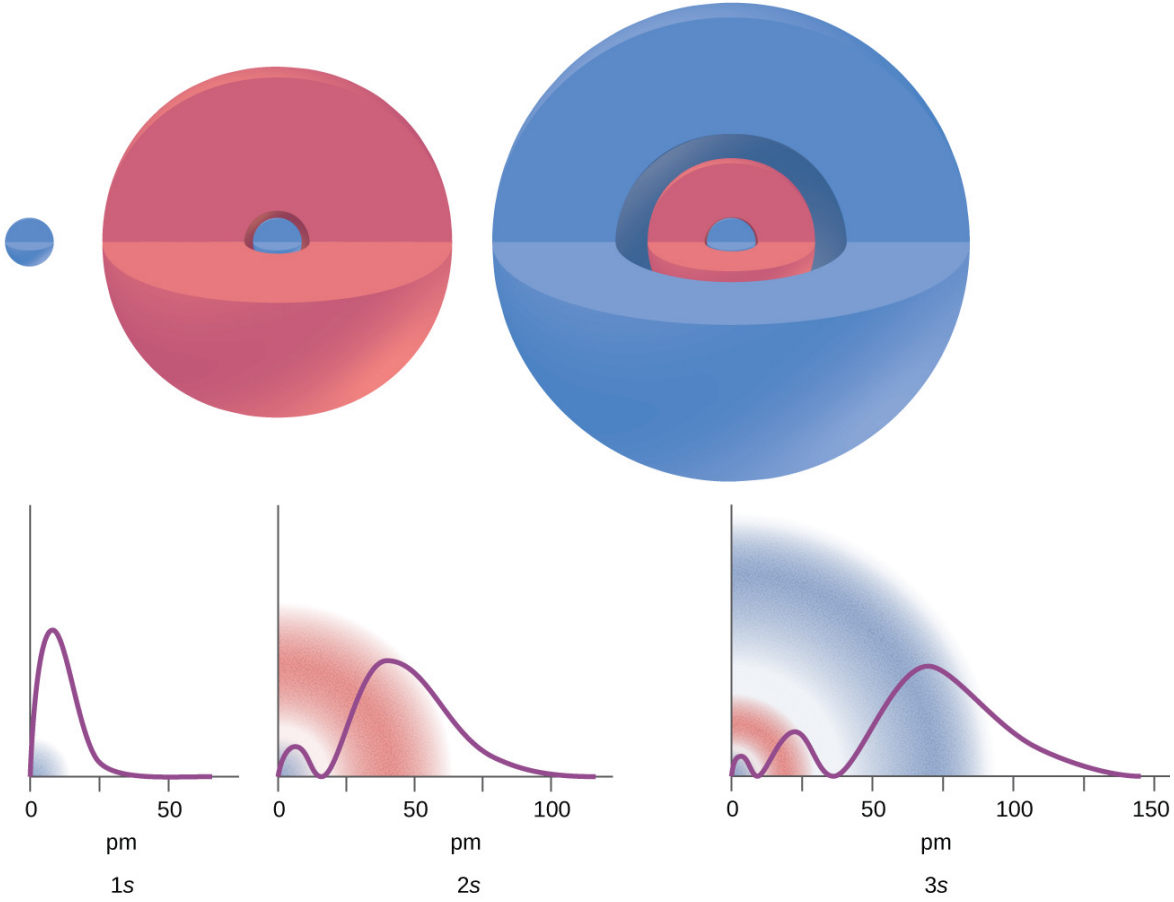


1s

Azul -superfície fronteira

FIGURE 2.6 The 1s-orbital. The simplest way of drawing an atomic orbital is as a boundary surface, a surface within which there is a high probability (typically 90%) of finding the electron. We shall use blue to denote s-orbitals, but that color is only an aid to their identification. The shading within the boundary surface is an approximate indication of the electron density at each point. The darker the shading, the higher is the probability of finding the electron at that distance from the nucleus.

Comparação entre orbitais s



Número quântico de momento angular *l*

para um determinado valor de ***n***, ***l* = 0, 1, 2, 3, … *n*-1**

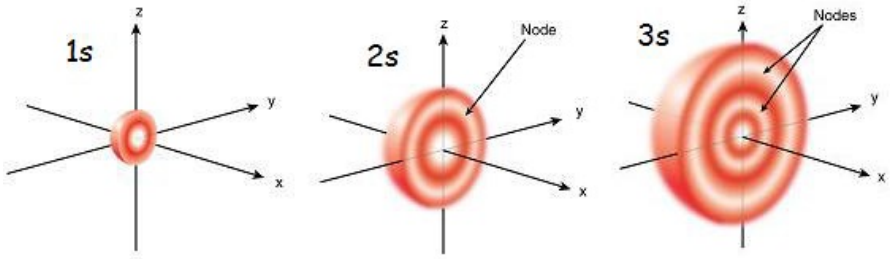
Os valores de l dependem de n

$n = 1$, $l = 0$	⇒	$l = 0$ orbital *s*
$n = 2$, $l = 0$ **ou** 1	⇒	$l = 1$ orbital *p*
$n = 3$, $l = 0, 1$ **ou** 2	⇒	$l = 2$ orbital *d*
$n = 4$, $l = 0, 1, 2$ ou 3	⇒	$l = 3$ orbital *f*

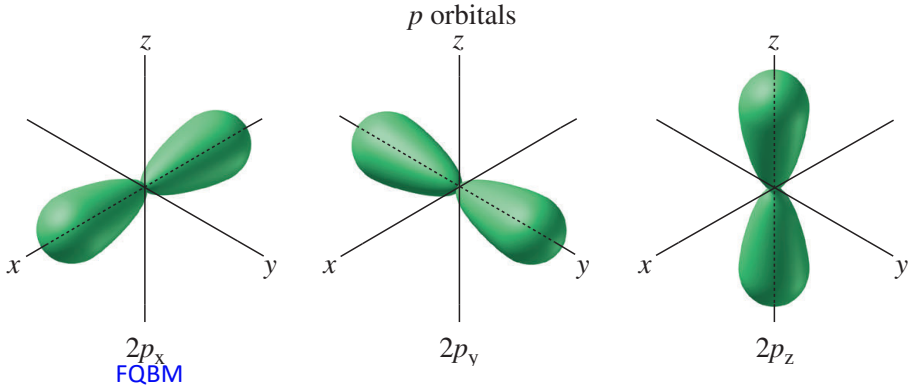
l define a forma do "volume" que a nuvem eletrónica ocupa no espaço (*a forma da orbital*)

Número quântico de momento agular *l*

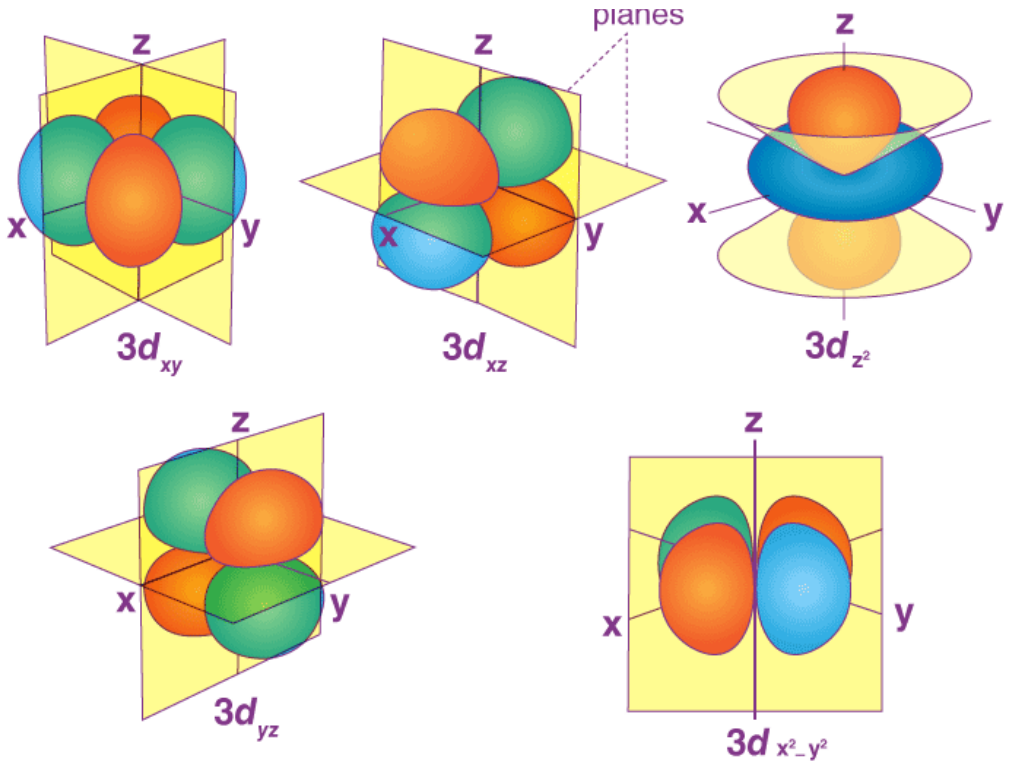
l = 0 (orbital *s*)



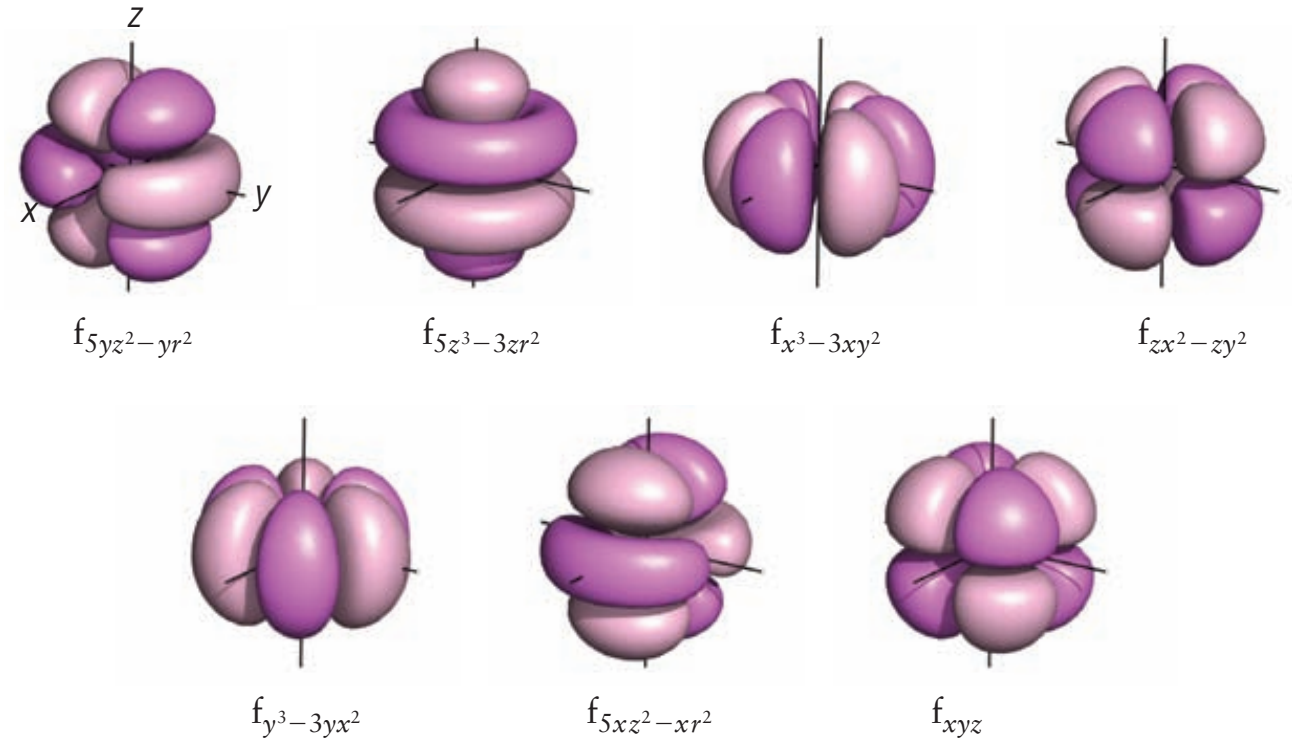
l = 1 (orbital *p*)



l = 2 (orbitais *d*)



l = 3 (orbitais *f*)



número quântico magnético m_l

para um determinado valor de *l*

m_l = -*l*, …., 0, …. +*l*

Para *l* = 1 (orbital p), m_l = -1, 0, **ou** 1

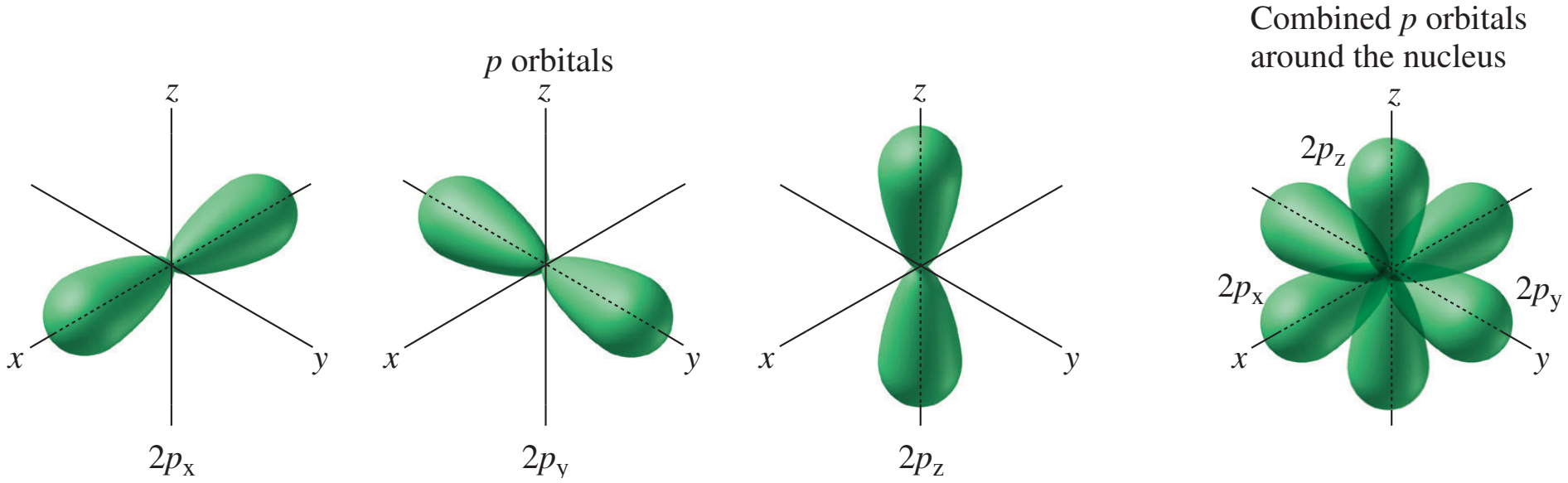
Para *l* = 2 (orbital d), m_l = -2, -1, 0, 1, **ou** 2

m_l Define a orientação da orbital no espaço

Orbitais p

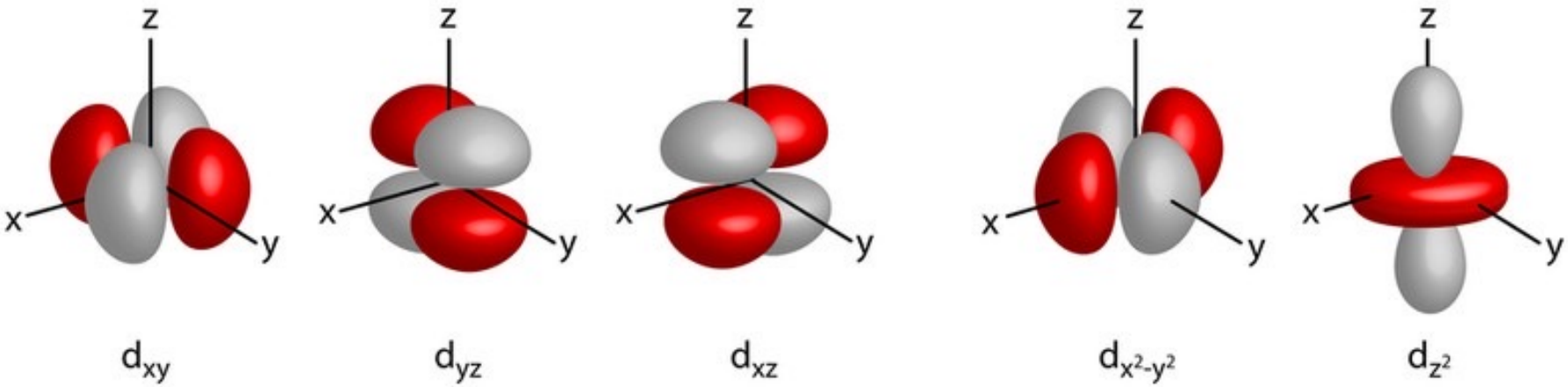
m_l = -1, 0, **ou** 1

3 orientações distintas no espaço



Orbitais d

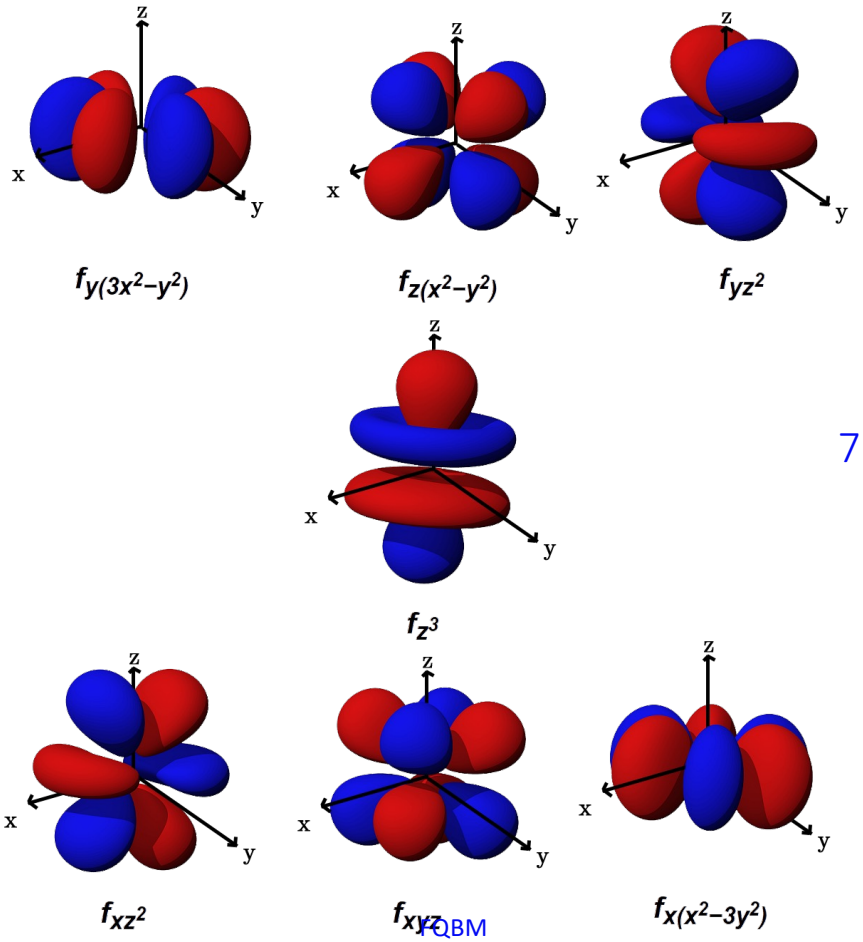
m_l = -2, -1, 0, 1, ou 2



5 orientações distintas no espaço

Orbitais f

m_l = −3, −2, −1, 0, 1, 2 ou 3



7 orientações distintas no espaço

Relação entre os números quânticos dos eletrões e as orbitais atómicas

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

TABLE 7.2 Relation Between Quantum Numbers and Atomic Orbitals

n	ℓ	m_ℓ	Number of Orbitals	Atomic Orbital Designations
1	0	0	1	$1s$
2	0	0	1	$2s$
	1	−1, 0, 1	3	$2p_x$, $2p_y$, $2p_z$
3	0	0	1	$3s$
	1	−1, 0, 1	3	$3p_x$, $3p_y$, $3p_z$
	2	−2, −1, 0, 1, 2	5	$3d_{xy}$, $3d_{yz}$, $3d_{xz}$, $3d_{x^2-y^2}$, $3d_{z^2}$
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮

Resumo

TABLE 2.2 Quantum Numbers for Electrons in Atoms

Name	Symbol	Values	Specifies	Indicates
principal	n	$1, 2, \ldots$	shell	size
orbital angular momentum*	l	$0, 1, \ldots, n-1$	subshell: $l = 0, 1, 2, 3, 4, \ldots$ s, p, d, f, g, . . .	shape
magnetic	m_l	$l, l-1, \ldots, -l$	orbitals of subshell	orientation
spin magnetic	m_s	$+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$	spin state	spin direction

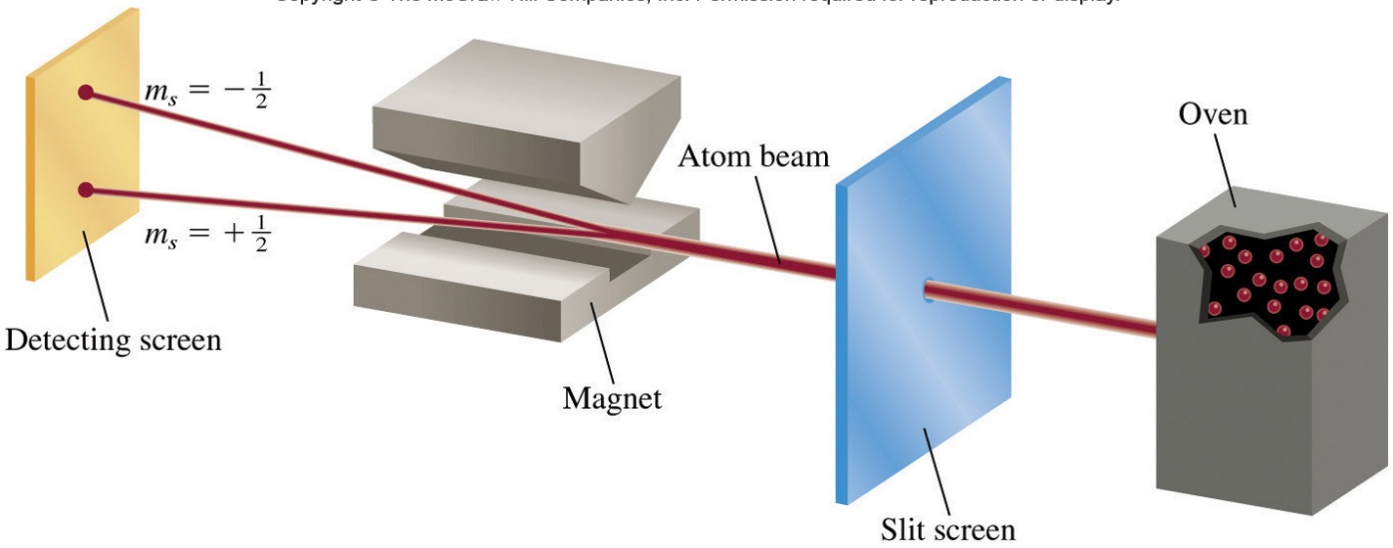
*Also called the azimuthal quantum number.

Spin eletrónico

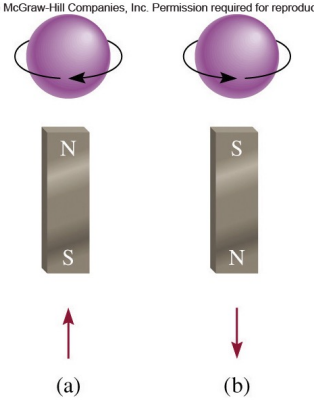
Linhas nos espectros do hidrogénio apareciam desdobradas. De acordo como o modelo cada risca tem uma frequência definida.

Experiencias de Stern e Gerlach 1924

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



número quântico de **spin** m_s

m_s = +½ **ou** -½

$m_s = +½$ $m_s = -½$

Principio de exclusão de Pauli

- Um eletrão num átomo (e o seu valor de energia) descrita por um única função de onda ψ .

- Uma orbital caracterizada por três números quânticos n, l, m_l, só pode conter dois eletrões, com spins (m_s) opostos.

Princípio de exclusão de Pauli- Num átomo não podem existir dois eletrões com o mesmo conjunto de 4 nºs quânticos (n, l, m_l, m_s)

Números quânticos, camadas e sub-camadas

números quânticos: (n, l, m_l, m_s)

Nível – eletrões com o mesmo valor de **n**

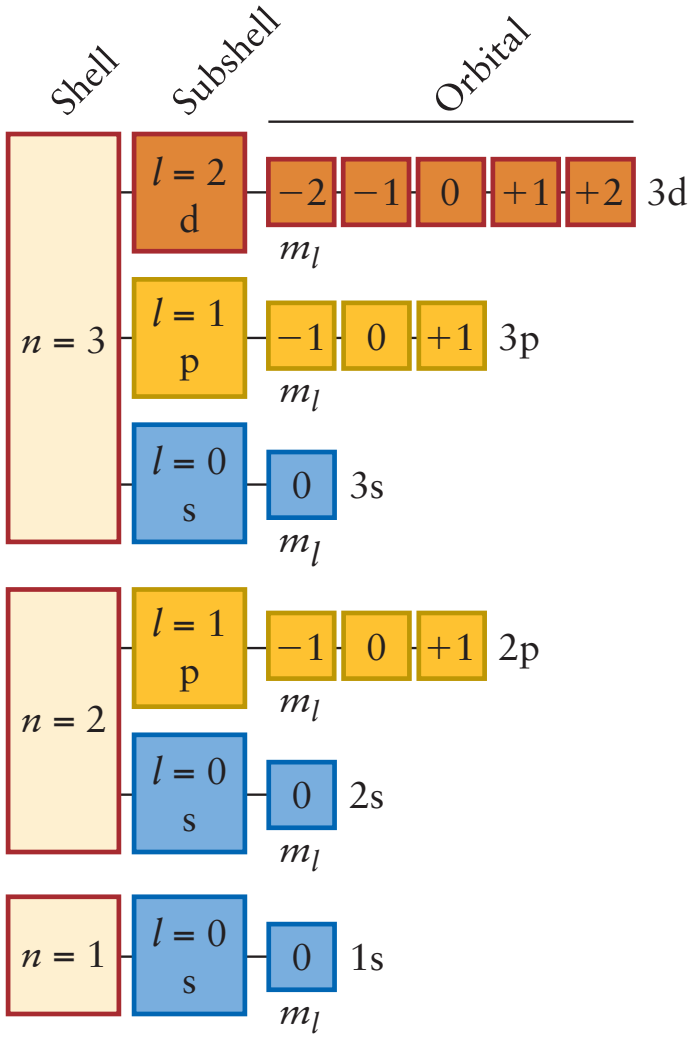
Sub-nível – eletrões com o mesmo valor de *n* **e** ***l***

Orbital – eletrões com o mesmo valor de *n, l,* **e** m_l

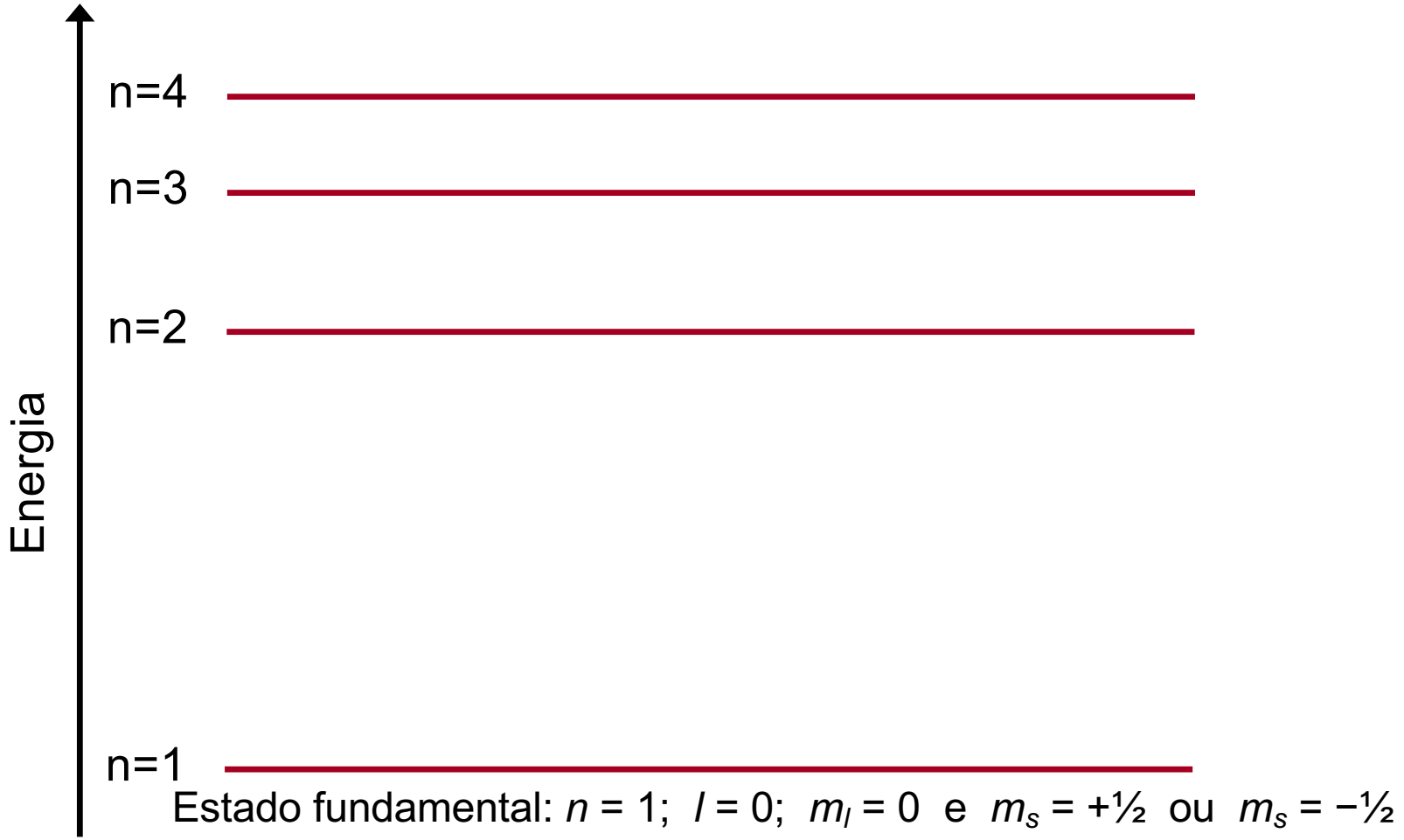
Quantos eletrões pode conter uma orbital?

Se *n, l,* e m_l são fixos, então m_s = ½ ou - ½

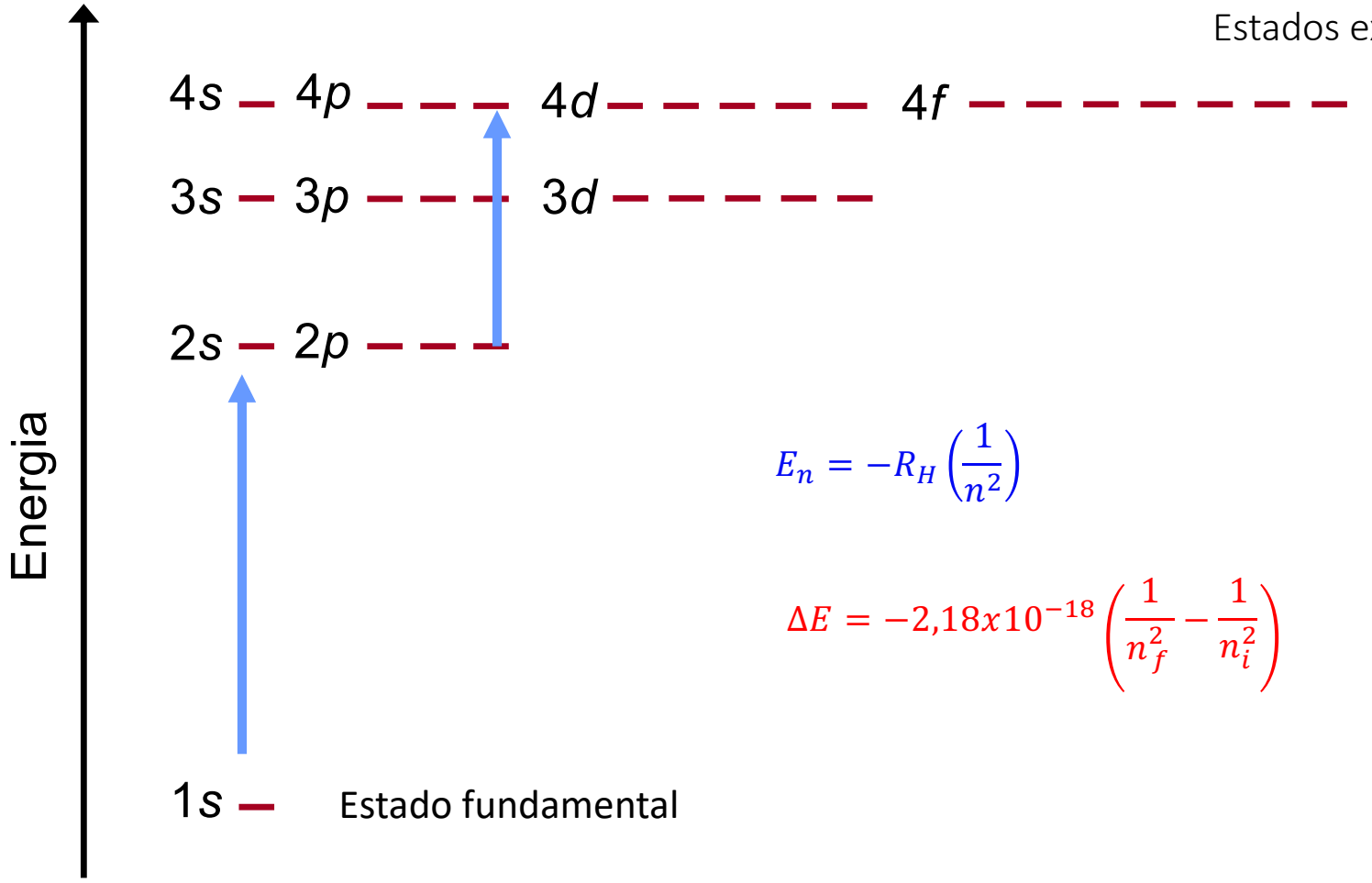
$y = (n, l, m_l, ½)$ or $y = (n, l, m_l, -½)$



Estrutura eletrónica do átomo de Hidrogénio



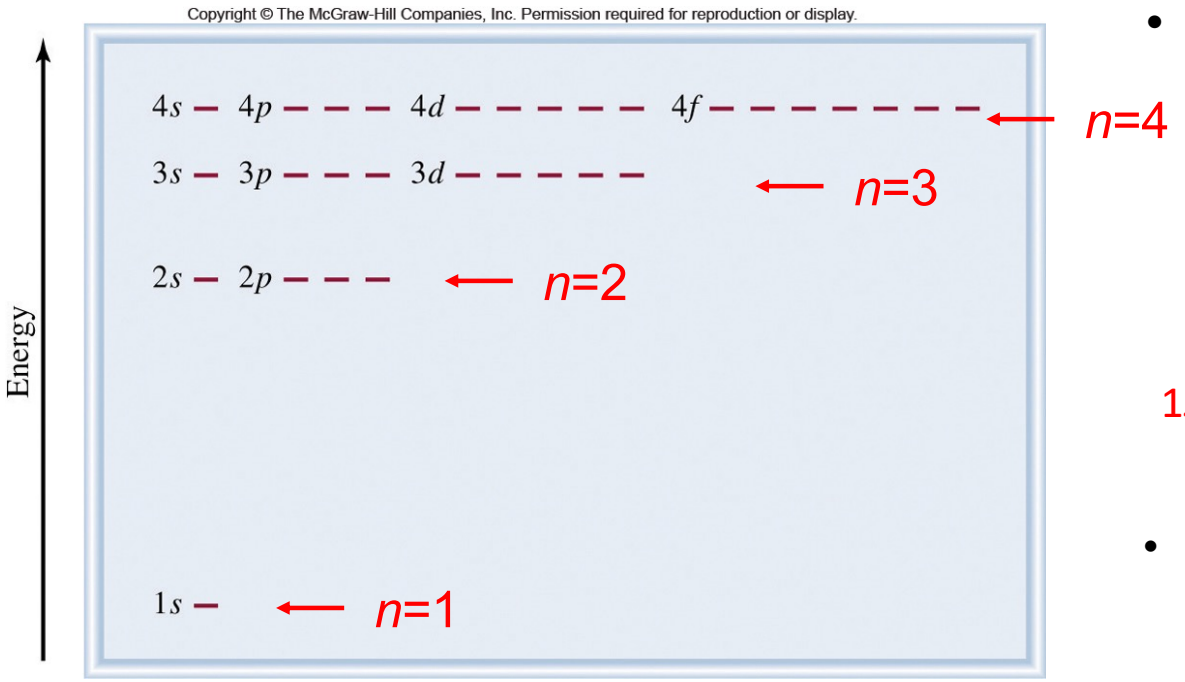
Estrutura eletrónica do átomo de Hidrogénio



$$E_n = -R_H\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

$$\Delta E = -2{,}18x10^{-18}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right)$$

Energia das orbitais num átomo com um único eletrão



- Depende apenas do número quântico principal *n*

$$E_n = -R_H\left(\frac{1}{n^2}\right)$$

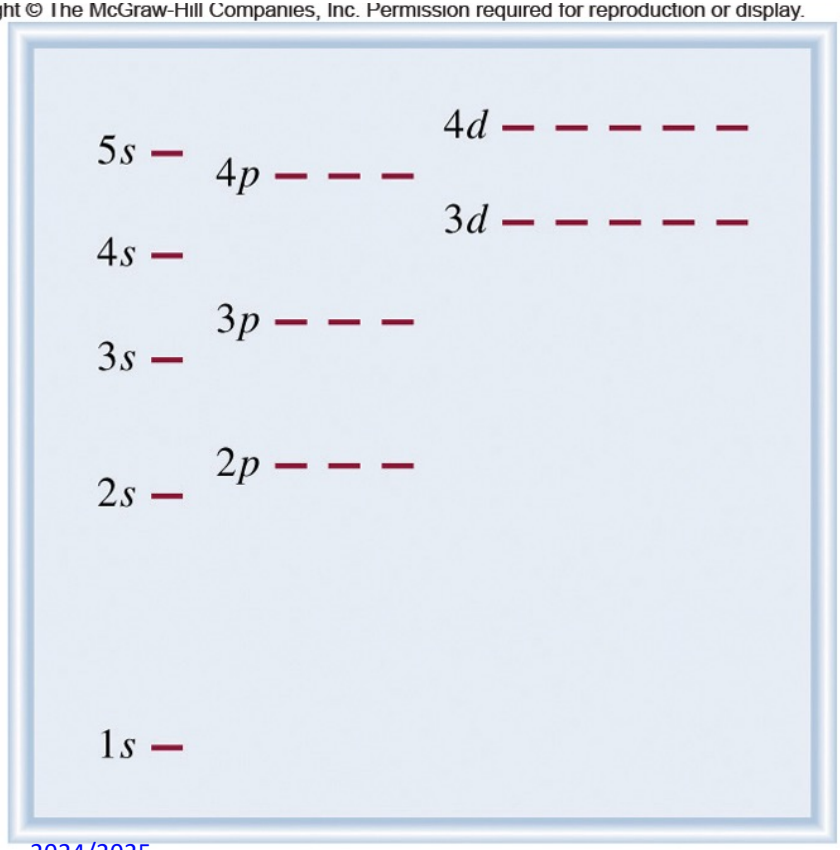
1*s* < 2*s* = 2*p* < 3*s*=3*p* =3*d* < 4*s*=4***p***=4*d* =4*f* < ---

- O modelo aplica-se a outras partículas "Hidrogenóides": He^{+}, Li^{2+}…
- Apenas se altera o valor de R_H

Energia das orbitais em átomos polieletrónicos

Diagrama de níveis de Energia para a átomos polieletrónicos

ght © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



A Energia depende de ***n*** e de ***l***

Orbitais com o mesmo **n** e diferente ***l***

apresentam energia diferentes

Estrututura eletrónica

- Como é que se preenchem as orbitais?

- No estado fundamental de um átomo, os electrões ocupam os niveis de menor energia

Energia das orbitais em átomos polieletrónicos

A Energia depende de n e de l

- Orbitais com o mesmo n e diferente l apresentam energia diferente devido ao efeito de blindagem das orbitais mais interiores

- As orbitais mais externas sentem menos o efeito da carga nuclear como resultado da "blindagem" pelas orbitais mais internas já preenchidas

- As orbitais *s* sentem menos o efeito de blindagem do que *as p* e estas do que as *d*, por "estarem mais proximas" do núcleo

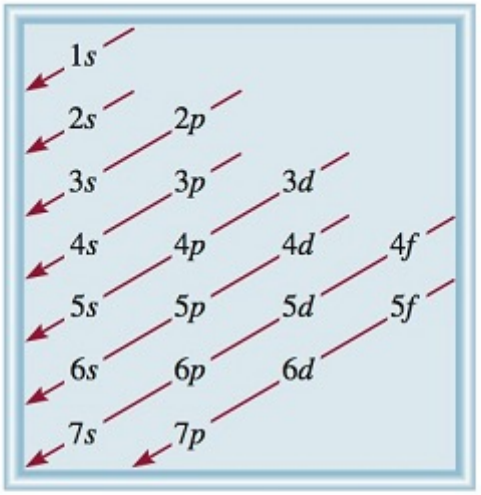
Energia das orbitais em átomos polieletrónicos

A ordem de energia das orbitais define a ordem pela qual os eletrões as vão preencher para os diferentes elementos multieletrónicos

Princípio de construção

1. Adicionar os eletrões um após o outro seguindo a ordem dos níveis de energia não colocando mais do que dois eletrões numa orbital.

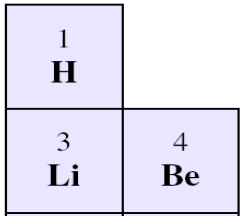
2. Numa subcamada se houver mais do que uma orbital disponível, primeiro preencher com um eletrão e só depois emparelhá-los.

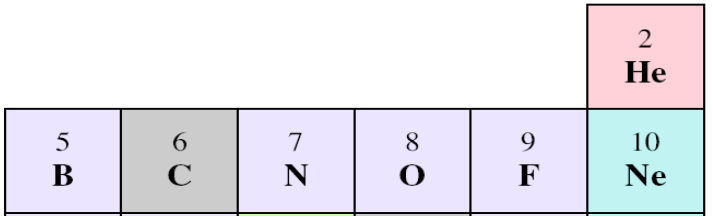


Define-se assim a configuração eletrónica de cada um dos elementos para $Z \leq 20$

1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s < 3d < 4p < 5s < 4d < 5p < 6s

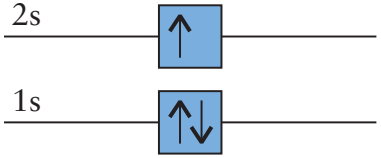
Preenchimento das orbitais em átomos polieletrónicos



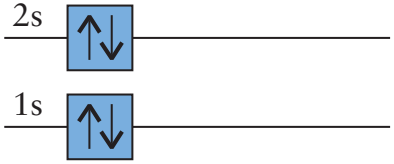


1 H $1s^1$

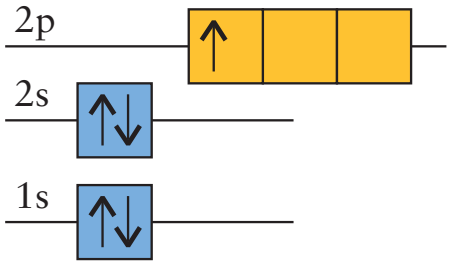
2 He $1s^2$



3 Li $1s^2 2s^1$, $[He]2s^1$

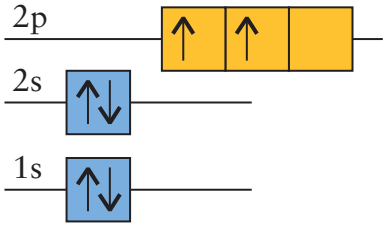


4 Be $1s^2 2s^2$, $[He]2s^2$

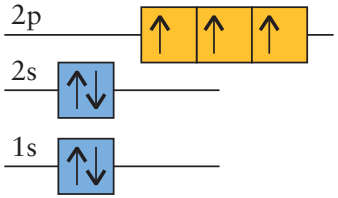


5 B $1s^2 2s^2 2p^1$, $[He]2s^2 2p^1$

Regra de Hund

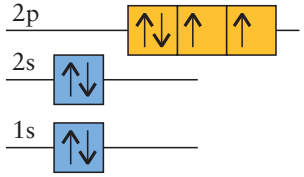


6 C $1s^2 2s^2 2p^2$, $[He]2s^2 2p^2$

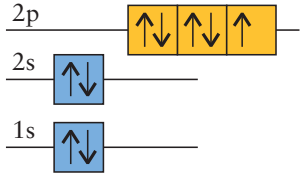


7 N $1s^2 2s^2 2p^3$, $[He]2s^2 2p^3$

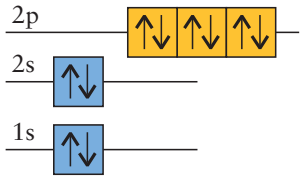
Regra de Hund: A configuração eletrónica mais estável é a que corresponde um maior número de spins paralelos (eletrões desemparelhados) no mesmo subnível .



8 O $1s^2 2s^2 2p^4$, $[He]2s^2 2p^4$

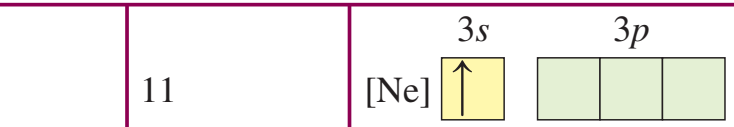


9 F $1s^2 2s^2 2p^5$, $[He]2s^2 2p^5$



10 Ne $1s^2 2s^2 2p^6$, $[He]2s^2 2p^6$

Preenchimento das orbitais em átomos polieletrónicos (*cont.*)

Element	Atomic Number	Orbital Diagram (3*s* and 3*p* orbitals only)	Electron Configuration	Abbreviated Electron Configuration
3*s* Block				
Na	11		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$	$[Ne]3s^1$
Mg	12		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$	$[Ne]3s^2$
3*p* Block				
Al	13		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^1$	$[Ne]3s^2 3p^1$
Si	14		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^2$	$[Ne]3s^2 3p^2$
P	15		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^3$	$[Ne]3s^2 3p^3$
S	16		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$	$[Ne]3s^2 3p^4$
Cl	17		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$	$[Ne]3s^2 3p^5$
Ar	18		$1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$[Ne]3s^2 3p^6$

Segunda parte

Estrutura atómica e relações periódicas entre elementos

- Tabela periodica
- Estrutura eletrónica e Tabela Periódica
- Periodicidade das propriedades atómicas (raio atómico, raio iónico, energia de ionização, afinidade eletrónica)

Chang, Cap. 7 and 8

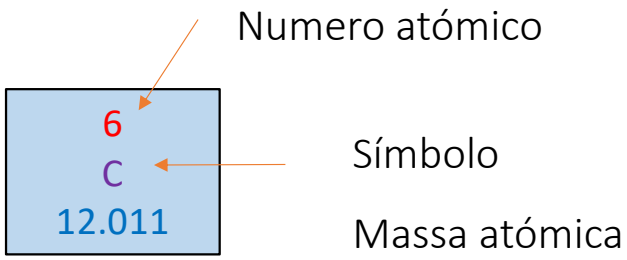
Atkins Cap.1

"Neon light" is a generic term for atomic emission involving various noble gases, mercury, and phosphor. The UV light from excited mercury atoms causes phosphor-coated tubes to fluoresce white light and other colors.

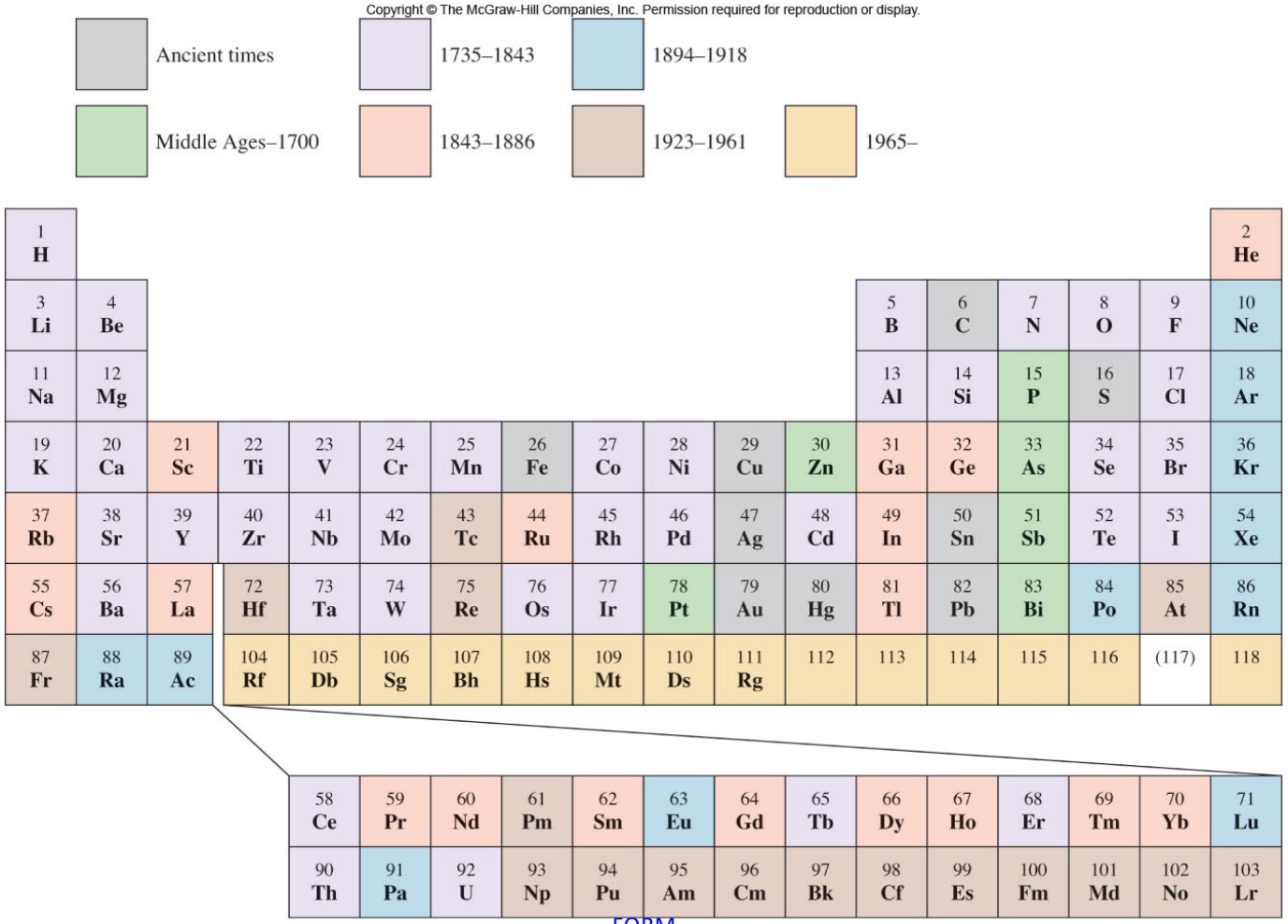
Tabela periódica

Dimitri Mendeleev-1869

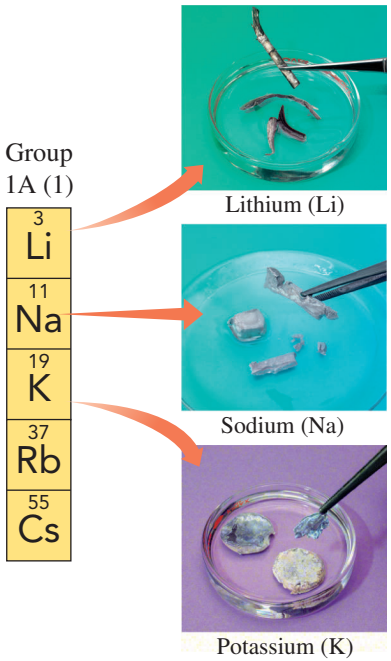
- 1. Os elementos foram organizados por ordem crescente de massa
- 2. Organizados em grupos de acordo com as semelhanças encontradas no seu comportamento Químico.



Perspetiva histórica

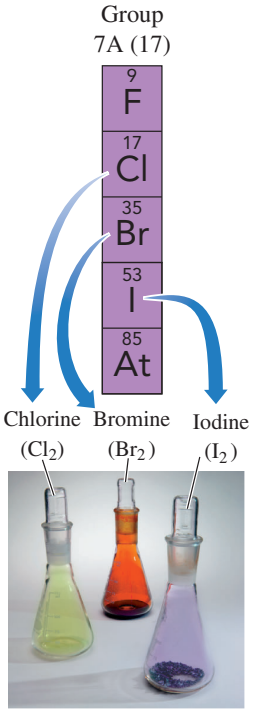


Metais alcalinos



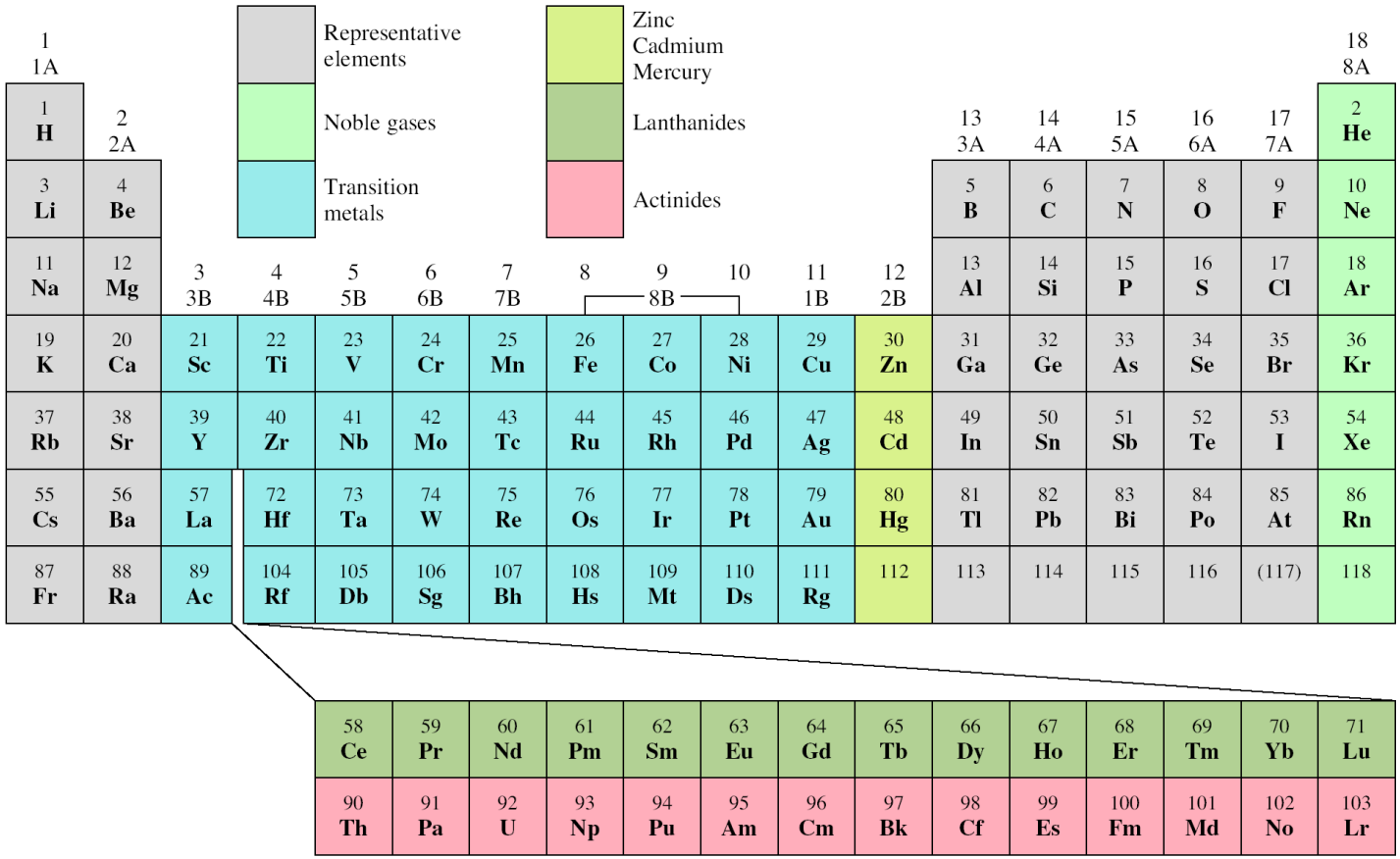
- *Condutores de eletricidade e calor*
- *Macios*
- *Reagem vigorosamente com a água*

Halogéneos



- *Altamente reativos entrando na composição de muitos compostos incluindo fármacos*

Classificação dos elementos



Elementos essenciais aos seres vivos

- Um elemento químico é considerado **essencial** quando a sua deficiência nas fontes nutritivas origina sintomas de carência e pode originar estados patológicos ou mesmo a morte.
- tem influência direta no funcionamento do organismo e está envolvido no seu metabolismo
- elementos essenciais não podem ser substituidos na totalidade por qualquer outro elemento químico.

Elementos ultra-vestigiais

devem ser essenciais para alguns animais e plantas - B, F, Si, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Se, Mo, I

possivelmente essenciais para alguns animais e plantas – As, Br, Sr, Cd, Sn, Ba, W

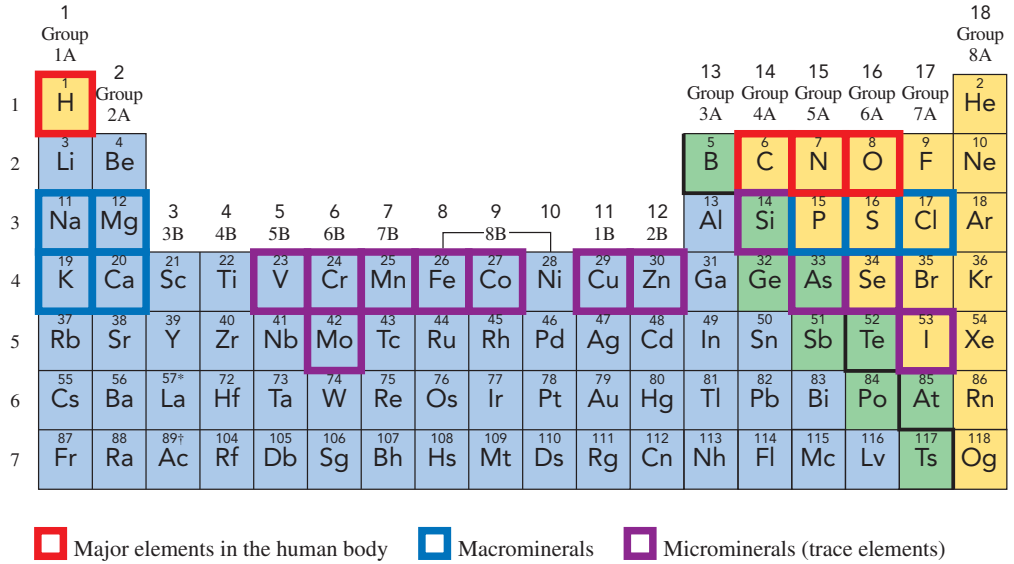
Chemistry Link to Health

Elements Essential to Health

Of all the elements, only about 20 are essential for the well-being and survival of the human body. Of those, four elements—oxygen, carbon, hydrogen, and nitrogen—which are representative elements in Period 1 and Period 2 on the periodic table, make up 96% of our body mass. Most of the food in our daily diet provides these elements to maintain a healthy body. These elements are found in carbohydrates, fats, and proteins. Most of the hydrogen and oxygen is found in water, which makes up 55 to 60% of our body mass.

The *macrominerals*—Ca, P, K, Cl, S, Na, and Mg—are located in Period 3 and Period 4 of the periodic table. They are involved in the formation of bones and teeth, maintenance of heart and blood vessels, muscle contraction, nerve impulses, acid–base balance of body fluids, and regulation of cellular metabolism. The macrominerals are present in lower amounts than the major elements, so that smaller amounts are required in our daily diets.

The other essential elements, called *microminerals* or *trace elements*, are mostly transition elements in Period 4 along with Si in Period 3 and Mo and I in Period 5. They are present in the human body in very small amounts, some less than 100 mg. In recent years, the detection of such small amounts has improved so that researchers can more easily identify the roles of trace elements. Some trace elements such as arsenic, chromium, and selenium are toxic at high levels in the body but are still required by the body. Other elements, such as tin and nickel, are thought to be essential, but their metabolic role has not yet been determined. Some examples and the amounts present in a 60.-kg person are listed in **TABLE 4.4**.



Elements essential to health include the major elements H, C, N, O (red), the macrominerals (blue), and the microminerals (purple).

Bulk Elements (kg)		Macrominerals (g)	
oxygen	44	calcium	1700
carbon	12.6	phosphorus	680
hydrogen	6.6	potassium	250
nitrogen	1.8	chlorine	115
sulfur	0.1	sodium	70
		magnesium	42
Trace Elements (mg)			
iron	5000	lead	35
silicon	3000	barium	21
zinc	1750	molybdenum	14
rubidium	360	boron	14
copper	280	arsenic	~3
strontium	280	cobalt	~3
bromine	140	chromium	~3
tin	140	nickel	~3
manganese	70	selenium	~2
iodine	70	lithium	~2
aluminum	35	vanadium	~2

https://chem.libretexts.org/Bookshelves/General_Chemistry/Book%3A_General_Chemistry%3A_Principles_Patterns_and_Applications_(Averill)/01%3A_Introduction_to_Chemistry/1.09%3A_Essential_Elements_for_Life

TABLE 4.4 Typical Amounts of Essential Elements in a 60.-kg Adult

Element	Quantity	Function
Major Elements		
Oxygen (O)	39 kg	Building block of biomolecules and water (H_2O)
Carbon (C)	11 kg	Building block of organic and biomolecules
Hydrogen (H)	6 kg	Component of biomolecules, water (H_2O), regulates pH of body fluids, stomach acid (HCl)
Nitrogen (N)	2 kg	Component of proteins and nucleic acids
Macrominerals		
Calcium (Ca)	1000 g	Needed for bones and teeth, muscle contraction, nerve impulses
Phosphorus (P)	600 g	Needed for bones and teeth, nucleic acids
Potassium (K)	120 g	Most common positive ion (K^+) in cells, muscle contraction, nerve impulses
Chlorine (Cl)	100 g	Most common negative ion (Cl^-) in fluids outside cells, stomach acid (HCl)
Sulfur (S)	86 g	Component of proteins, vitamin B_1, insulin
Sodium (Na)	60 g	Most common positive ion (Na^+) in fluids outside cells, water balance, muscle contraction, nerve impulses
Magnesium (Mg)	36 g	Component of bones, required for metabolic reactions
Iron (Fe)	3600 mg	Component of oxygen carrier hemoglobin
Silicon (Si)	3000 mg	Needed for growth and maintenance of bones and teeth, tendons and ligaments, hair and skin
Zinc (Zn)	2000 mg	Needed for metabolic reactions in cells, DNA synthesis, growth of bones, teeth, connective tissue, immune system
Copper (Cu)	240 mg	Needed for blood vessels, blood pressure, immune system
Manganese (Mn)	60 mg	Needed for growth of bones, blood clotting, metabolic reactions
Iodine (I)	20 mg	Needed for proper thyroid function
Molybdenum (Mo)	12 mg	Needed to process Fe and N from food
Arsenic (As)	3 mg	Needed for growth and reproduction
Chromium (Cr)	3 mg	Needed for maintenance of blood sugar levels, synthesis of biomolecules
Cobalt (Co)	3 mg	Component of vitamin B_{12}, red blood cells
Selenium (Se)	2 mg	Used in the immune system, health of heart and pancreas
Vanadium (V)	2 mg	Needed in the formation of bones and teeth, energy from food

Periodic Table of Medicines

Estrutura eletrónica dos átomos e Tabela Periódica

- A que se deve a forma tabela periódica em que os grupos tem tamanhos diferentes?
- Como se explica as variações periódicas dos elementos observadas ao longo data Tabela periódicas?
- Como se explica que elementos do mesmo grupo apresentem comportamento químico semelhante?

Resposta

As propriedades dos elementos são determinada pelo arranjo dos electrões nos átomos.

Configuração eletrónica

Configuração eletrónica descreve a forma como os eletrões são distribuídos entre as várias orbitais atómicas num átomo.

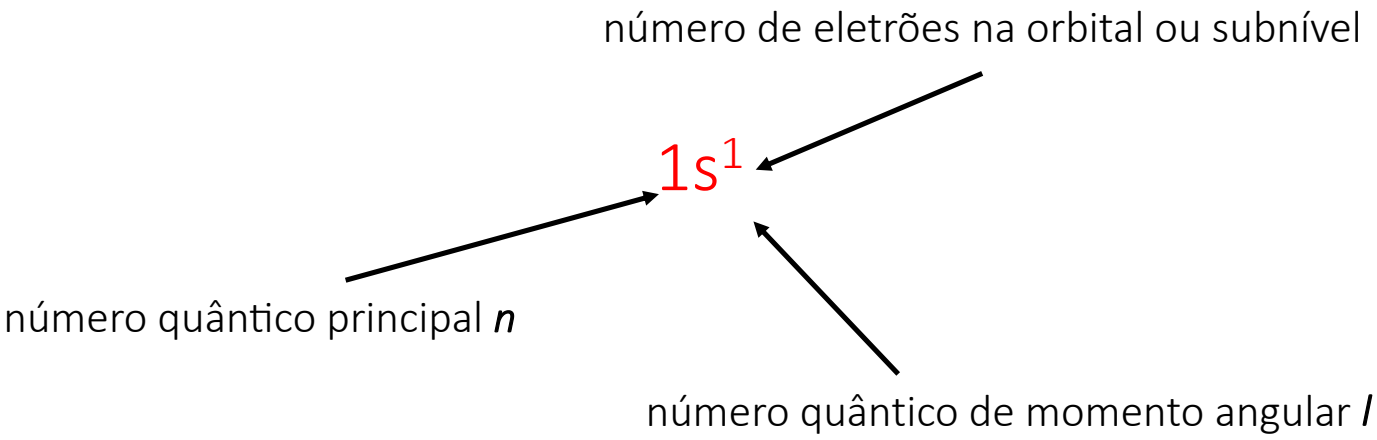
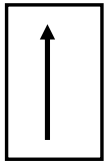


Diagrama de caixas

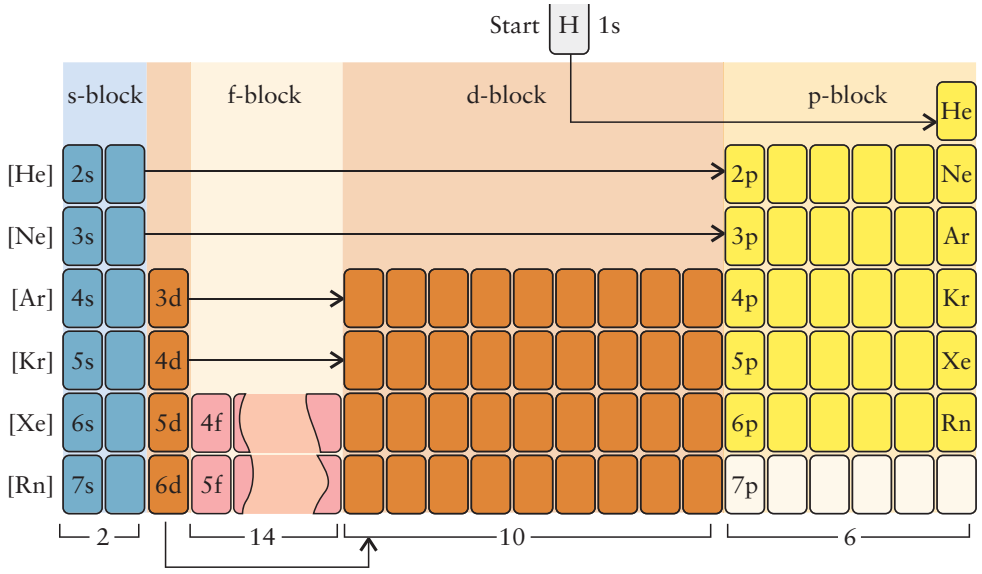


H

1s1

Estrutura eletrónica e Tabela Periódica

How is an atom's electron configuration related to its chemical behaviour, and why do elements with similar behaviour occur in the same periodic table group?



- Raio atómico
- Raio iónico
- Energia de ionização
- Afinidade electrónica

Periodicidade nas propriedades dos átomos

A variação das propriedades dos elementos ao longo da TP depende da atração sentida pelos eletrões de valência, ou seja da configuração eletronica.

- *Carga nuclear efetiva* (Z_{ef}) é a "carga positiva" efetiva sentida por um eletrão. $Z_{ef} = Z - \sigma$

  $0 < \sigma < Z$ (σ = *constante de blindagem*)

  Aproximação útil:

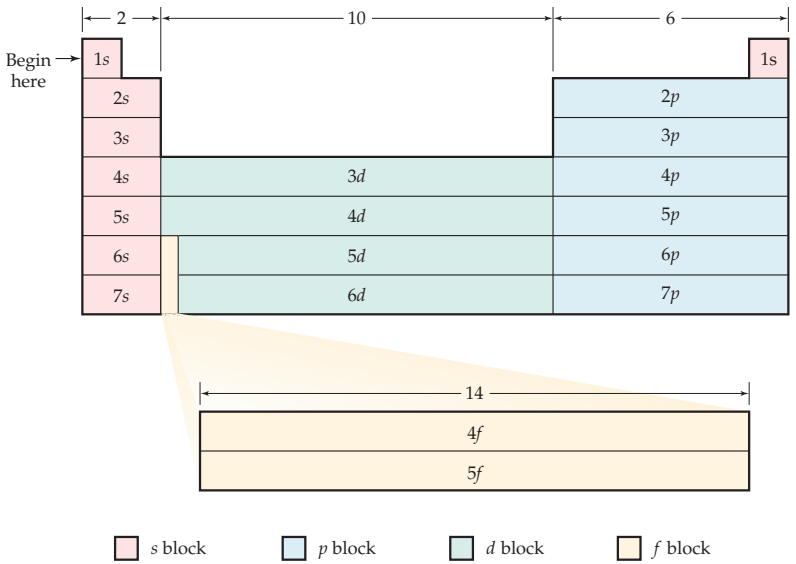
  $Z_{ef} \approx Z$ – número de eletrões da camada interna (cerne do átomo)

  Exemplo: $_6C$ $1s^2\ 2s^2\ 2p^2$ $Z_{ef} = 6 - 2 = 4$

- A energia dos níveis de energia e afetada

$$E_n = -Z_{eff}^2 R_H \left(\frac{1}{n^2}\right)$$

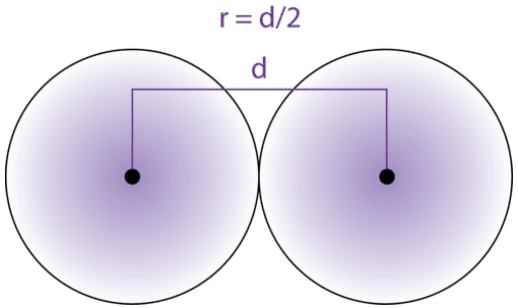
Estrutura eletrónica e Tabela Periódica

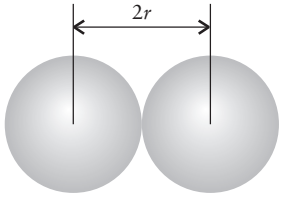


Prever como a carga nuclear efetiva pode afetar as periódicas dos átomos:

- Tamanho do átomo
- A facilidade com que um eletrão das camadas mais externas pode ser removido ou pode ser atraído (energia de ionização ou afinidade electronica).

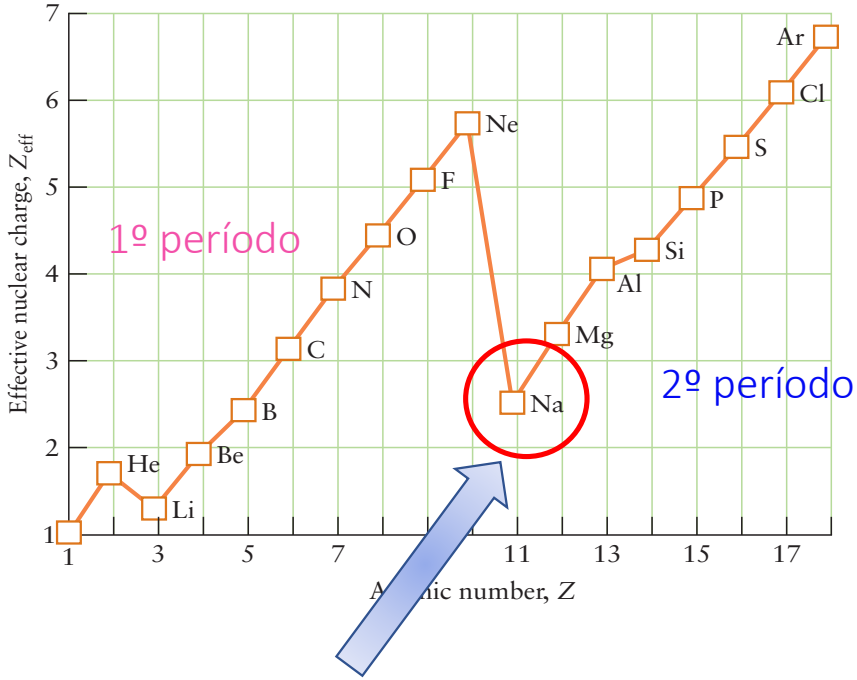
Raio atómico





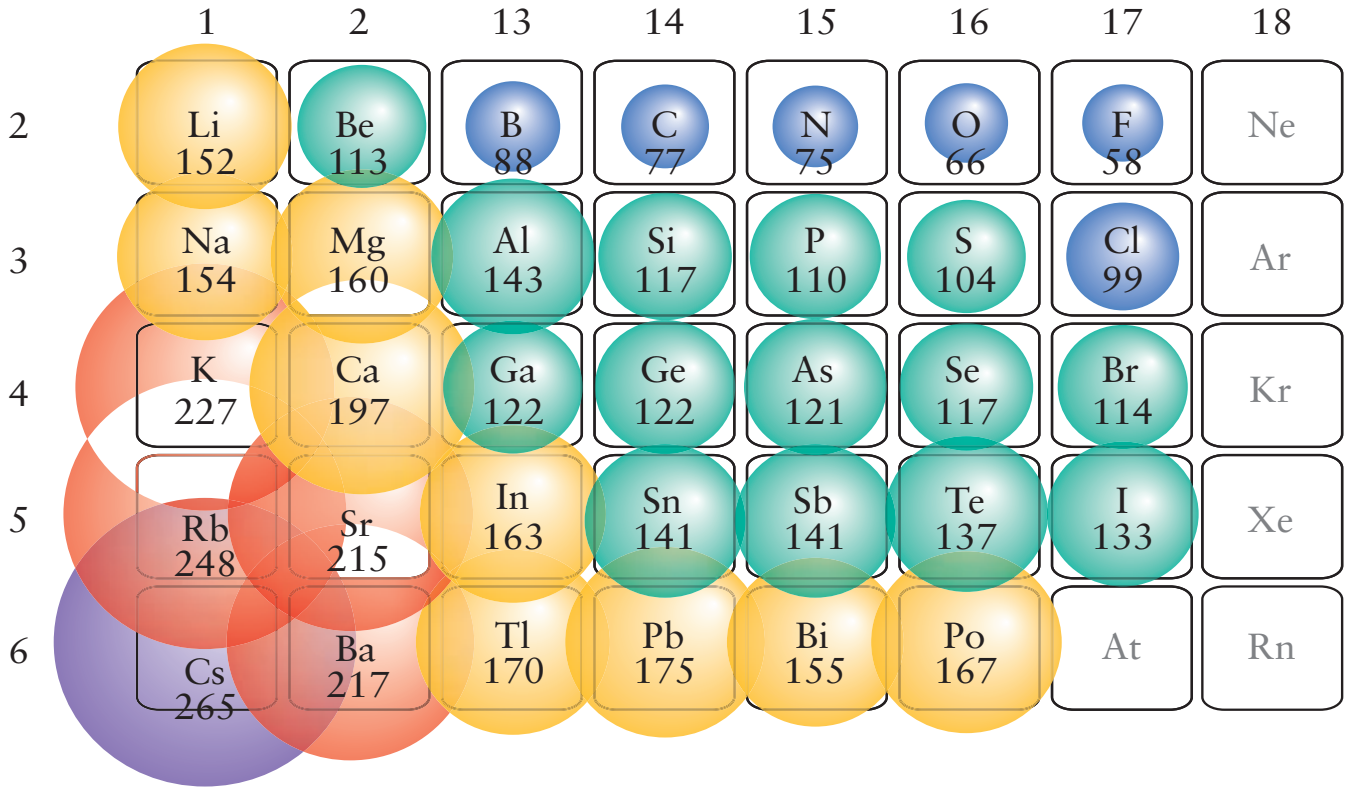
11 Atomic radius

A carga nuclear efetiva aumenta ao longo do período da esquerda para a direita



Inicio de uma nova camada

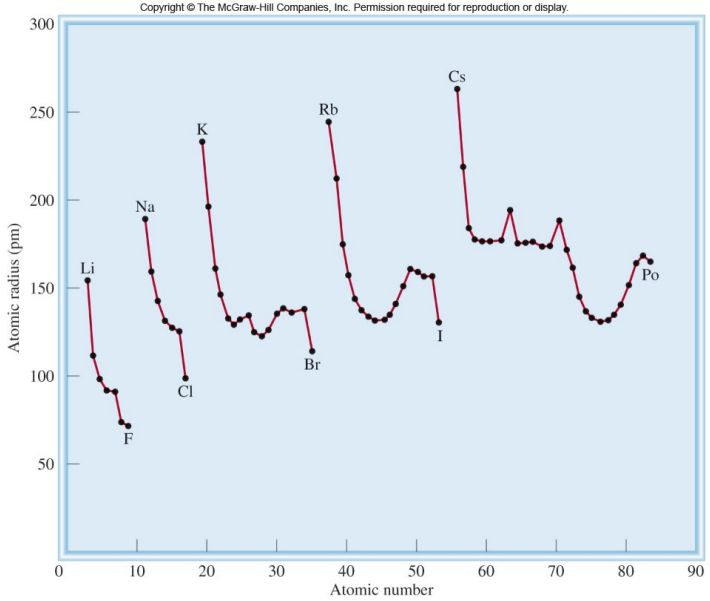
Variação periódica dos raios atómicos dos elementos com o número atómico (cont)



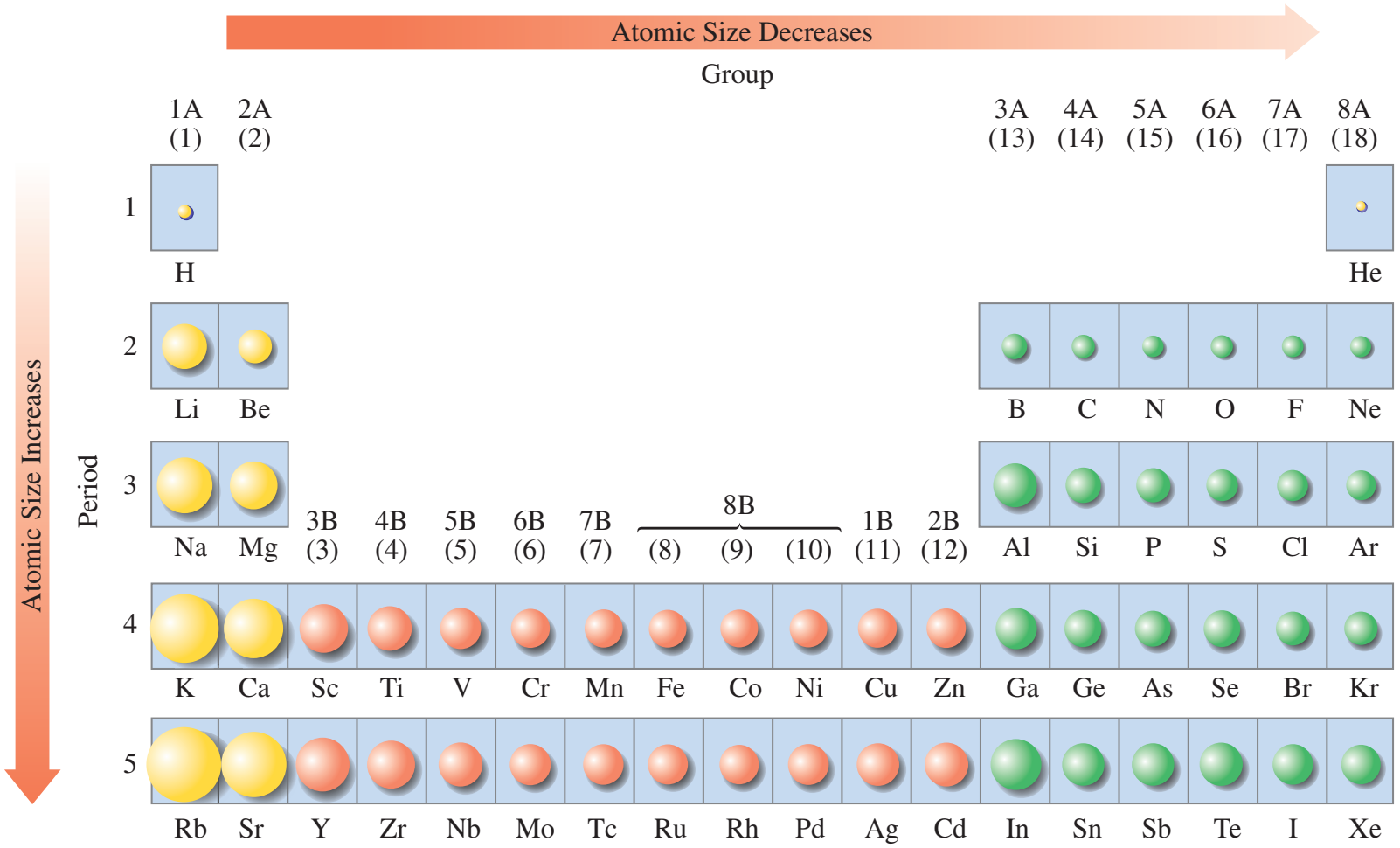
Os raios atómicos (em picómetros) dos elementos dos grupos principais

Variação periódica dos raios atómicos dos elementos com o número atómico (cont)

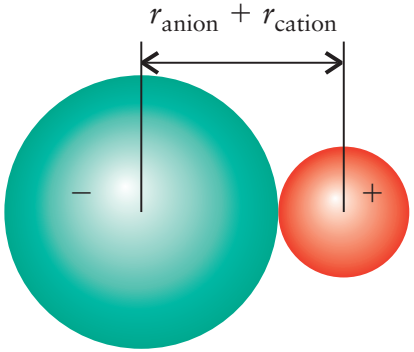
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Conclusão o raio atómico em geral diminui ao através do período com o aumento das carga nuclear efetiva e aumenta ao longo do grupo (de cima para baixo) por ocupação de níveis com numero quântico principal crescente.


Atomic Size Decreases
Group
1A (1)
2A (2)
3A (13)
4A (14)
5A (15)
6A (16)
7A (17)
8A (18)
Period
Atomic Size Increases
1
H
He
2
Li
Be
B
C
N
O
F
Ne
3
Na
Mg
3B (3)
4B (4)
5B (5)
6B (6)
7B (7)
8B
(8)
(9)
(10)
1B (11)
2B (12)
Al
Si
P
S
Cl
Ar
4
K
Ca
Sc
Ti
V
Cr
Mn
Fe
Co
Ni
Cu
Zn
Ga
Ge
As
Se
Br
Kr
5
Rb
Sr
Y
Zr
Nb
Mo
Tc
Ru
Rh
Pd
Ag
Cd
In
Sn
Sb
Te
I
Xe

Raio iónico

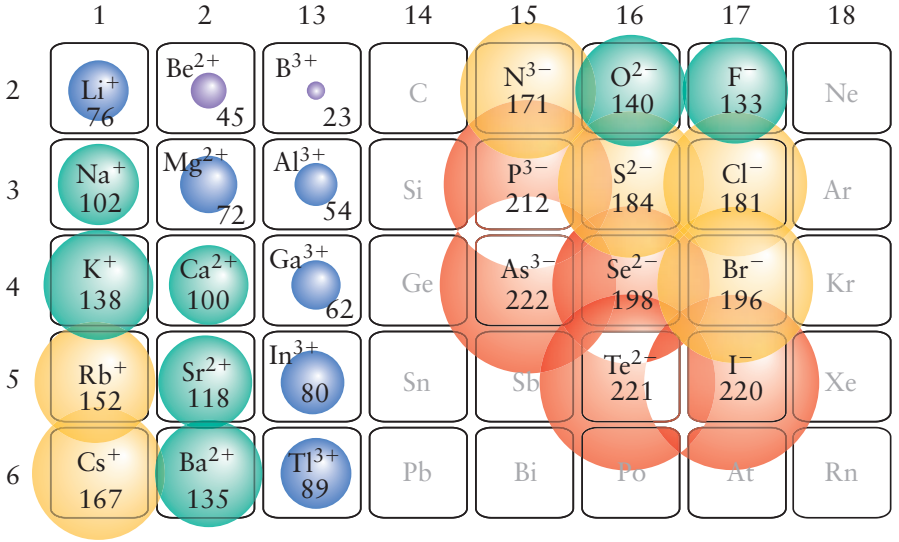


12 Ionic radius

Variação dos raios iónicos segue a tendencia dos raios atómicos

Raio do ião óxido O^{2-} = 140 pm

Exemplo:
Distância entre centros dos iões de MgO = 212 pm
raio do ião magnésio : 212 – 140 = 72 pm.

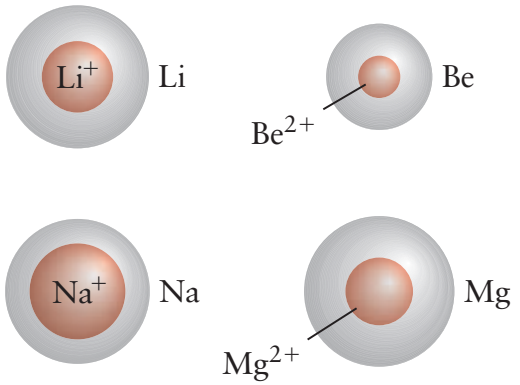


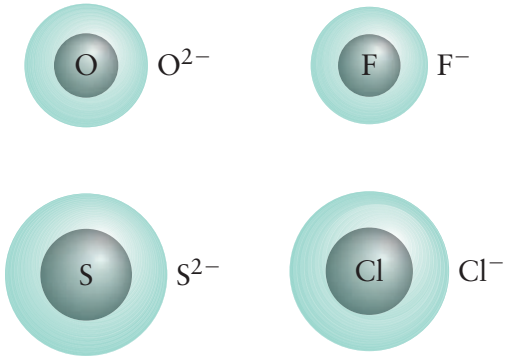
Raios atómicos *versus* raios iónicos

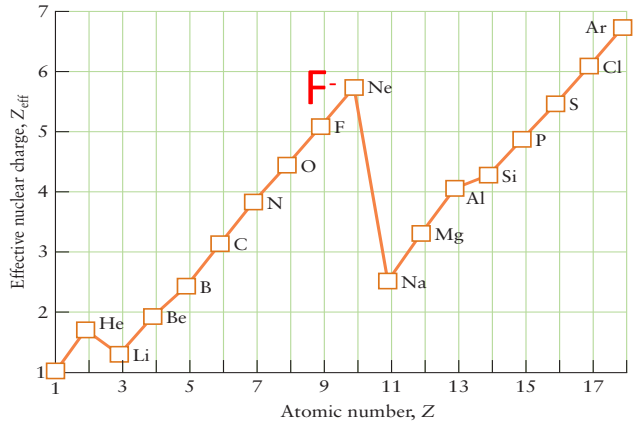
Catiões tem raios menores do que os seus átomos parentes,
enquanto que os aniões tem raios maiores

Espécies isoeletrónicas: átomos ou iões com o mesmo numero de eletrões

Na^+, F^- e Mg^{2+}, [He] $2s^2$, $2p^6$

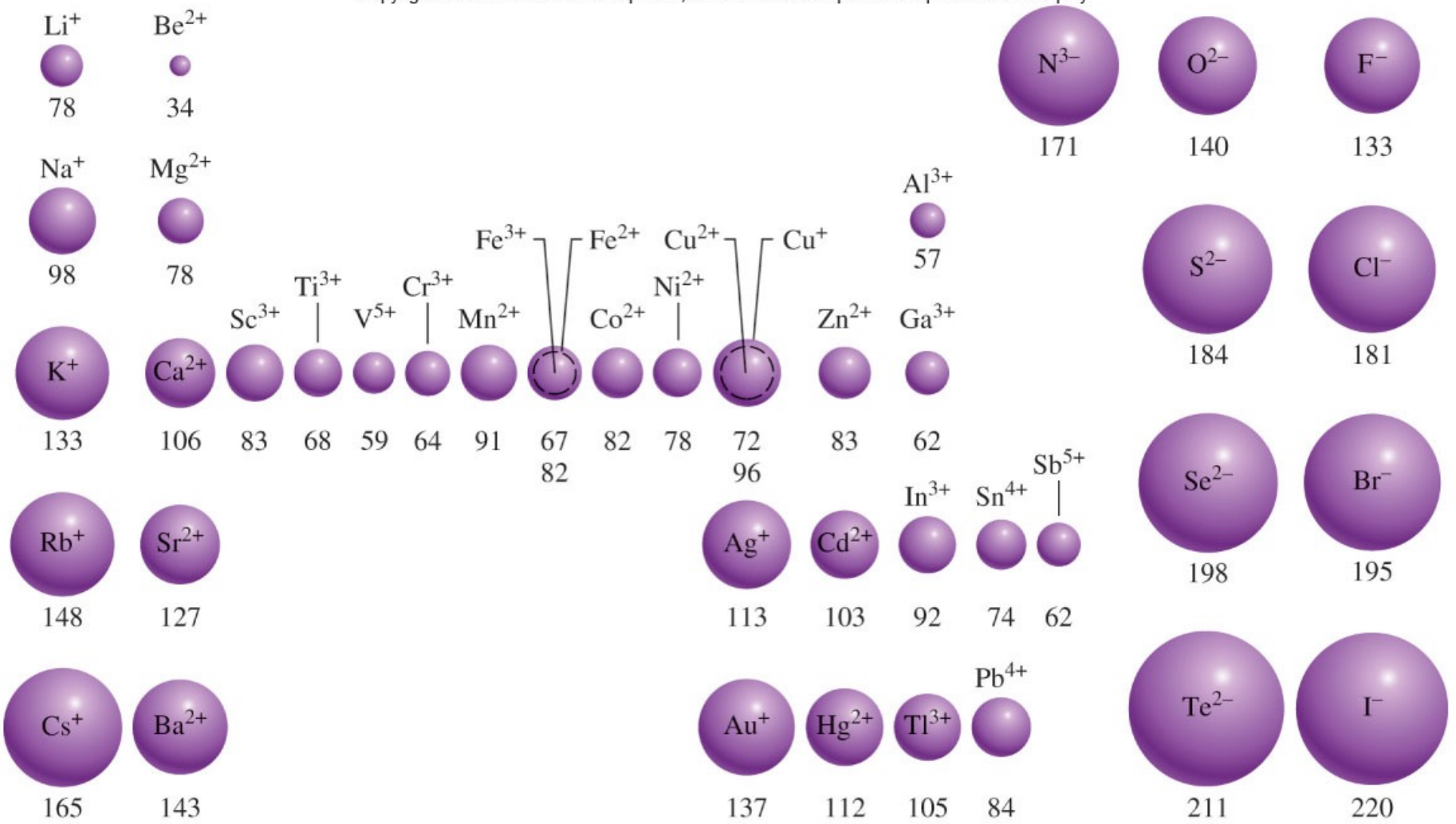




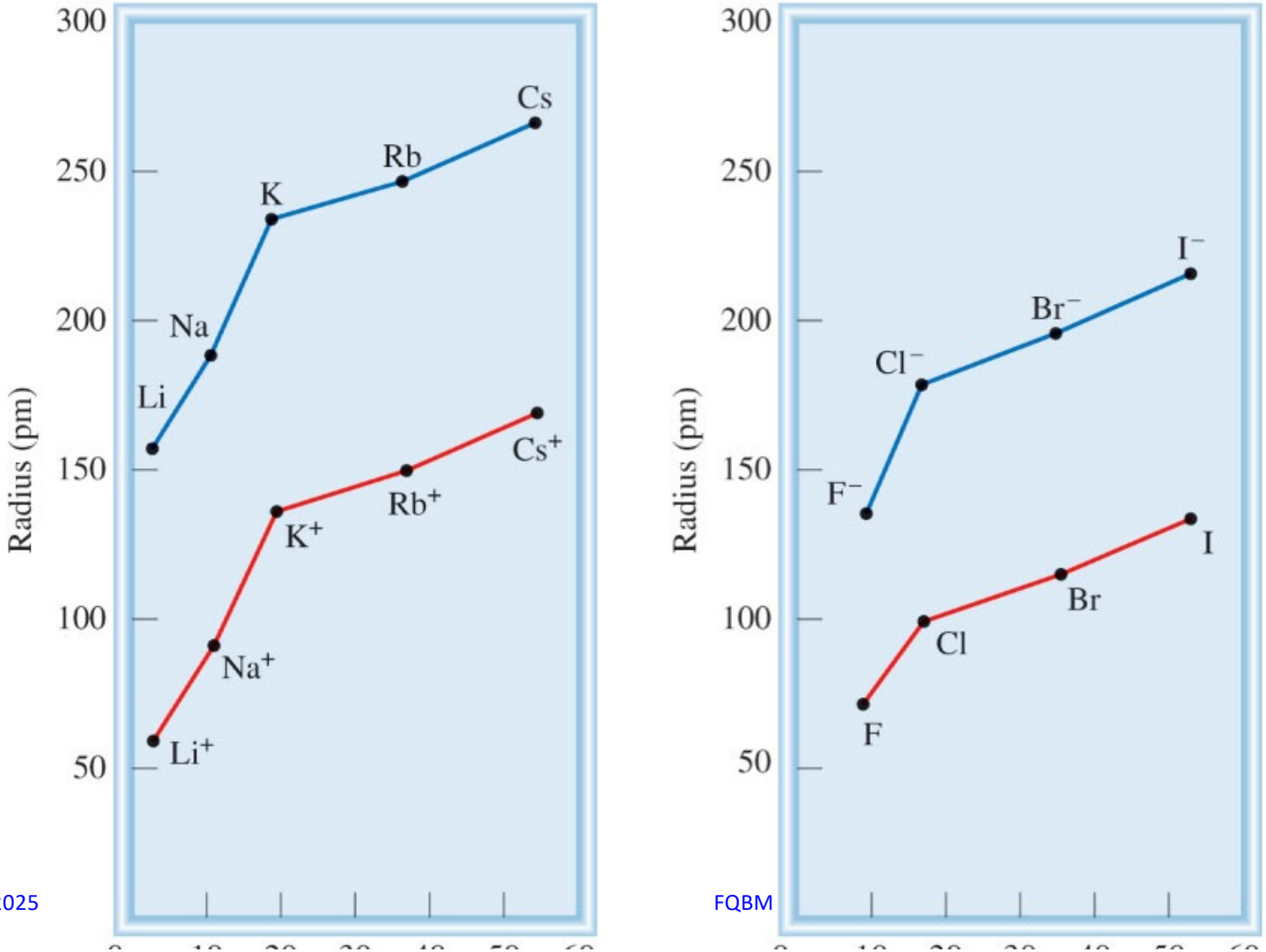


Raio iónico segue a ordem $F^- > Na^+ > Mg^{2+}$, porquê? (carga nuclear ?). F- tem a menor carga (menor numero de protões) dos três iões logo maior raio iónico)

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



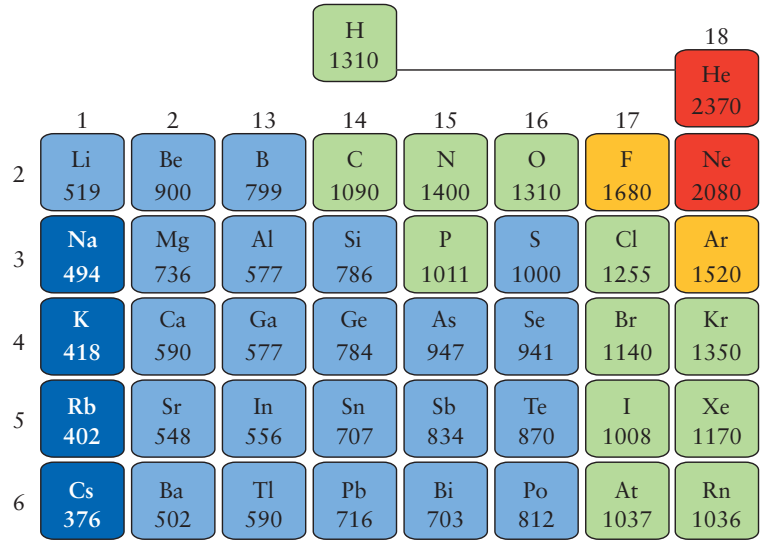
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Energia de ionização

A energia de ionização é a energia necessária para remover um eletrão de um átomo na fase gasosa.

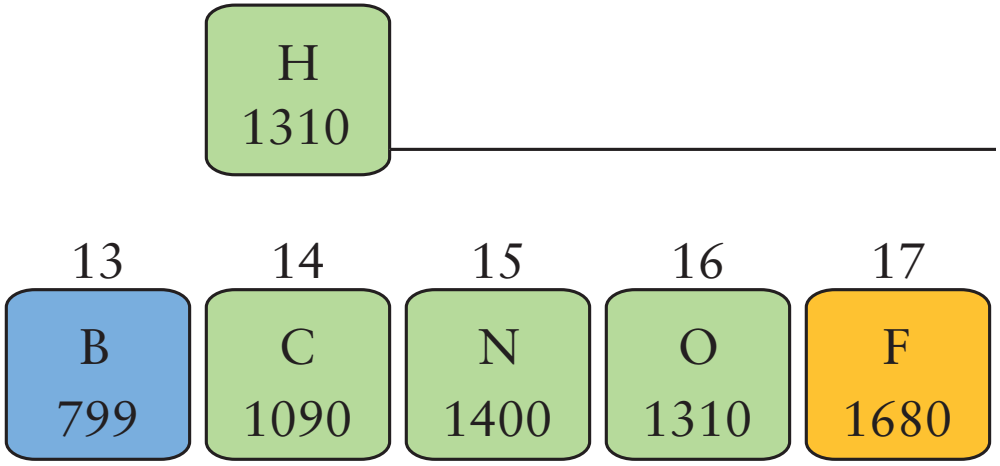
$$X(g) \longrightarrow X^+(g) + e^-(g) \qquad I = E(X^+) - E(X)$$

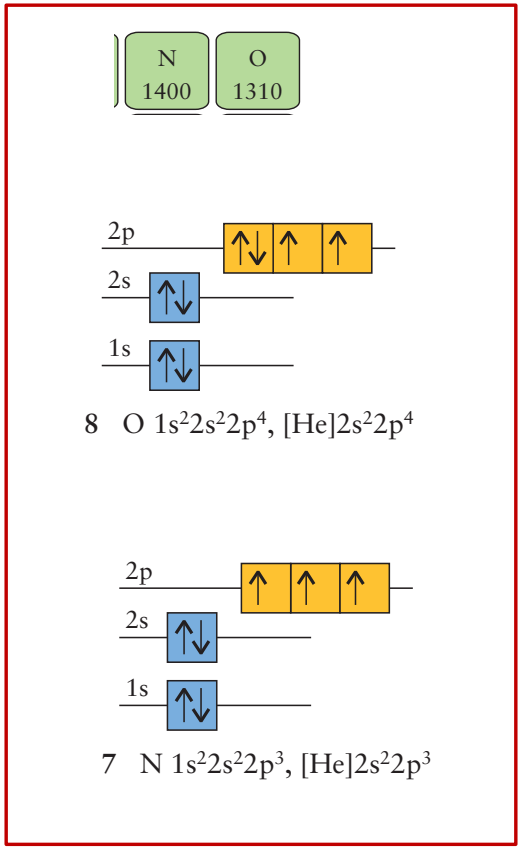


Primeiras energias de ionização (em kJ/mol) dos elementos do grupo principal

A energia de ionização aumenta ao longo do período com o aumento da carga nuclear efetiva e diminui ao longo grupo coma diminuição da carga nuclear efetiva. Mas existem exceções

Variação periódica da 1ª Energia de ionização



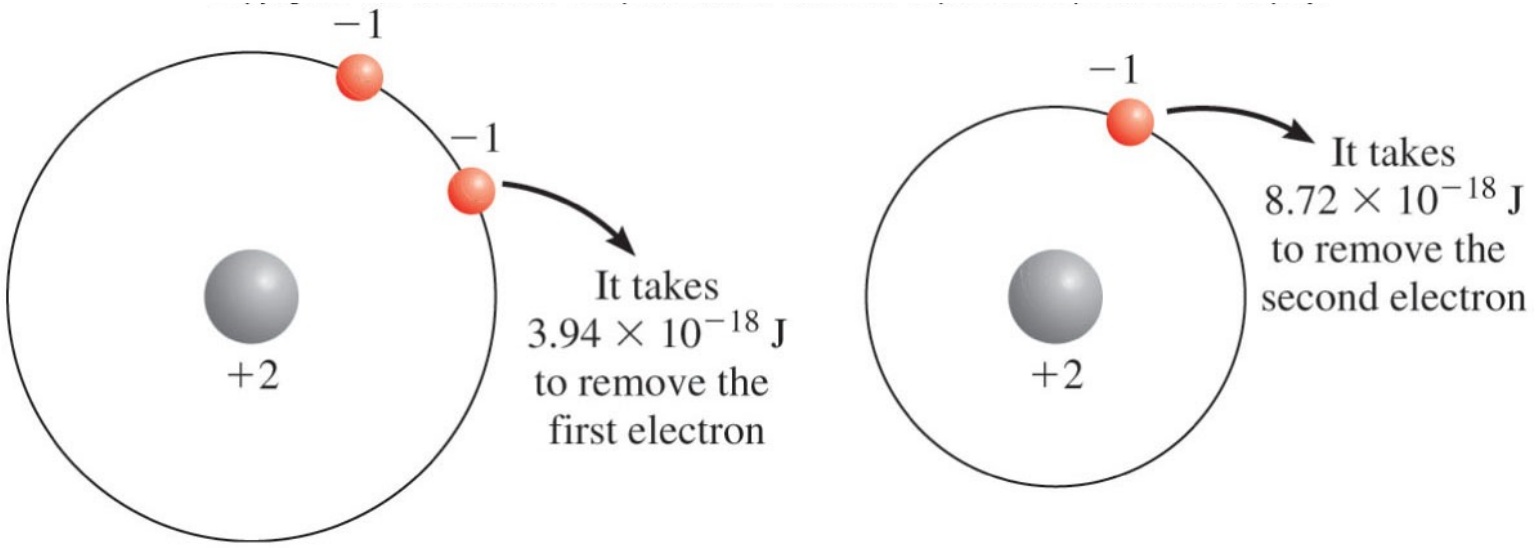


1310 kJ/mol

1400 kJ/mol

Energias de ionização sucessivas

Átomo de hélio $1s^2$

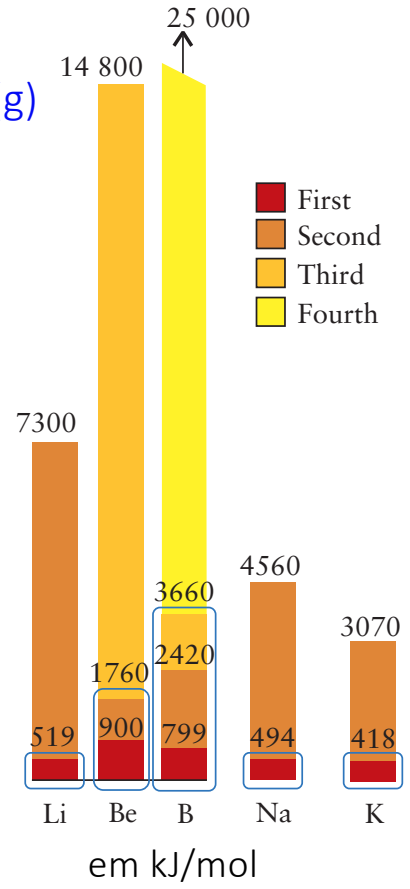


Energias de ionização sucessivas

$$X(g) \xrightarrow{1ª} X^{+}(g) + e^{-}(g) \xrightarrow{2ª} X^{2+}(g) + e^{-}(g) \xrightarrow{3ª} X^{3+}(g) + e^{-}(g) \xrightarrow{4ª} X^{4+}(g) + e^{-}(g)$$

As variações dependem da configuração electrónica

Li $1s^2\ 2s^1$ ⇨ $Li^+\ 1s^2$ ⇨ $Li^{2+}\ 1s^1$



Afinidade eletrónica

A afinidade eletrónica, E_{ea}, de um elemento, é a energia que se liberta quando um eletrão se liga a um átomo na fase gasosa.

$X(g) + e^-(g) \longrightarrow X^-(g)$ $\qquad E_{ea}(X) = E(X^-) - E(X)$

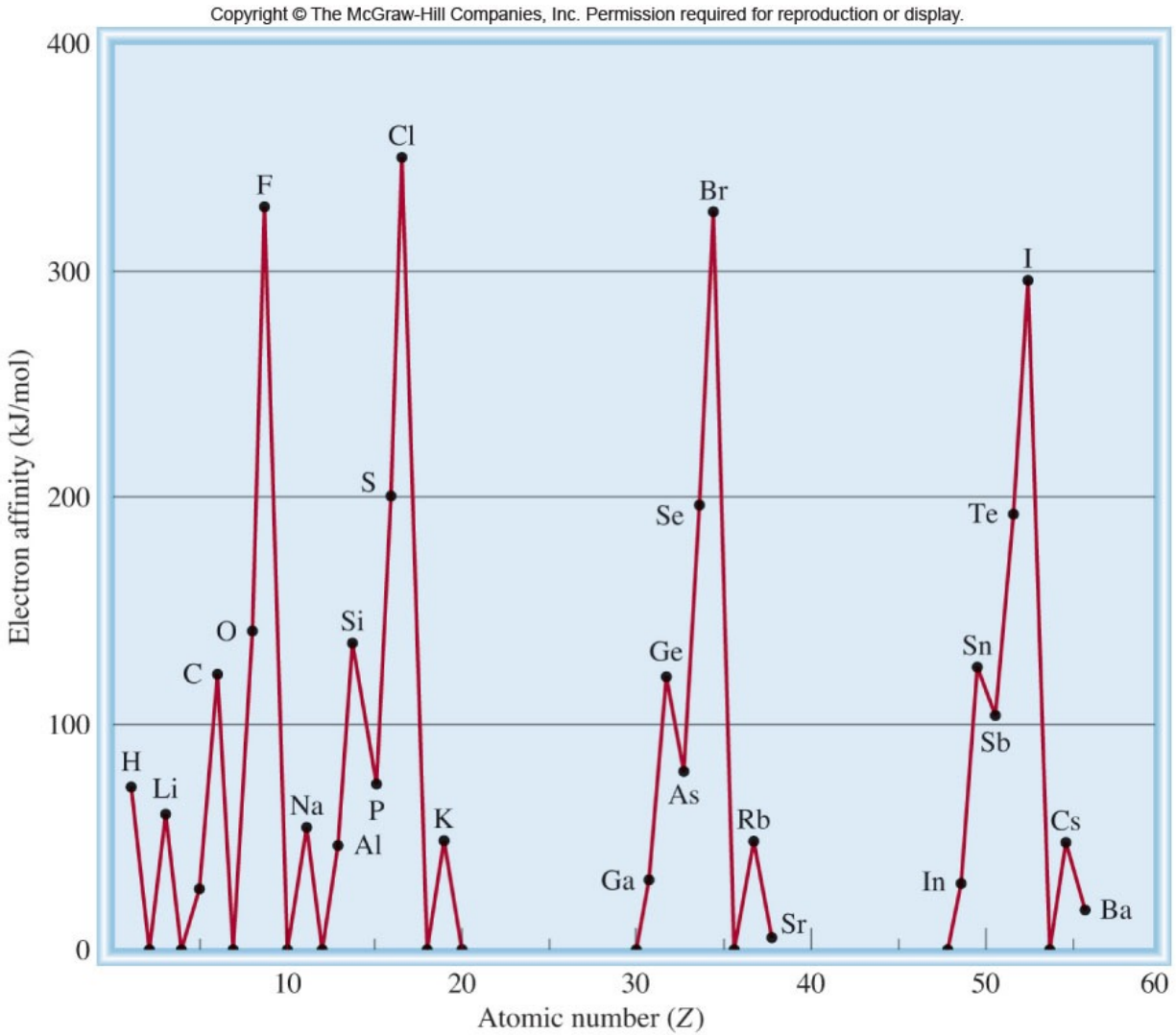
$Cl(g) + e^-(g) \longrightarrow Cl^-(g)$ $\qquad$ -349 kJ/mol

	1	2	13	14	15	16	17	18
	H +73							He <0
2	Li +60	Be ≤0	B +27	C +122	N −7	O +141 −844	F +328	Ne <0
3	Na +53	Mg ≤0	Al +43	Si +134	P +72	S +200, −532	Cl +349	Ar <0
4	K +48	Ca +2	Ga +29	Ge +116	As +78	Se +195	Br +325	Kr <0
5	Rb +47	Sr +5	In +29	Sn +116	Sb +103	Te +190	I +295	Xe <0
6	Cs +46	Ba +14	Tl +19	Pb +35	Bi +91	Po +174	At +270	Rn <0

A afinidade eletrónica é positiva (349 kJ/mol) se a reação é exotérmica e negativa se a reação é endótermica

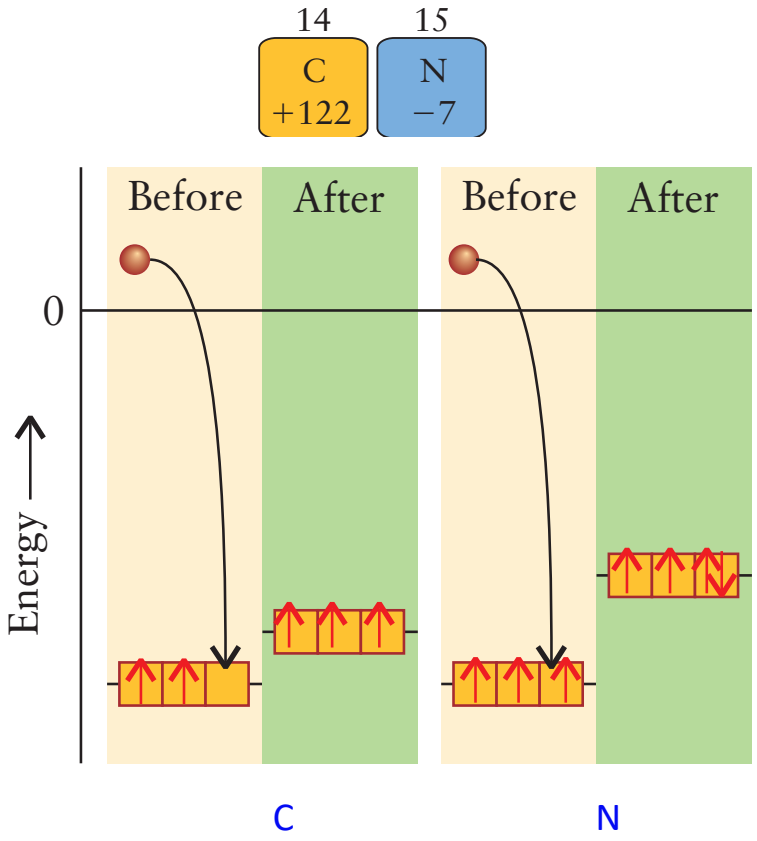
Variação da Afinidade Eletrónica (kJ/mol), dos elementos do grupo principal.

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



E mais difícil de estabelecer tendências periódicas.

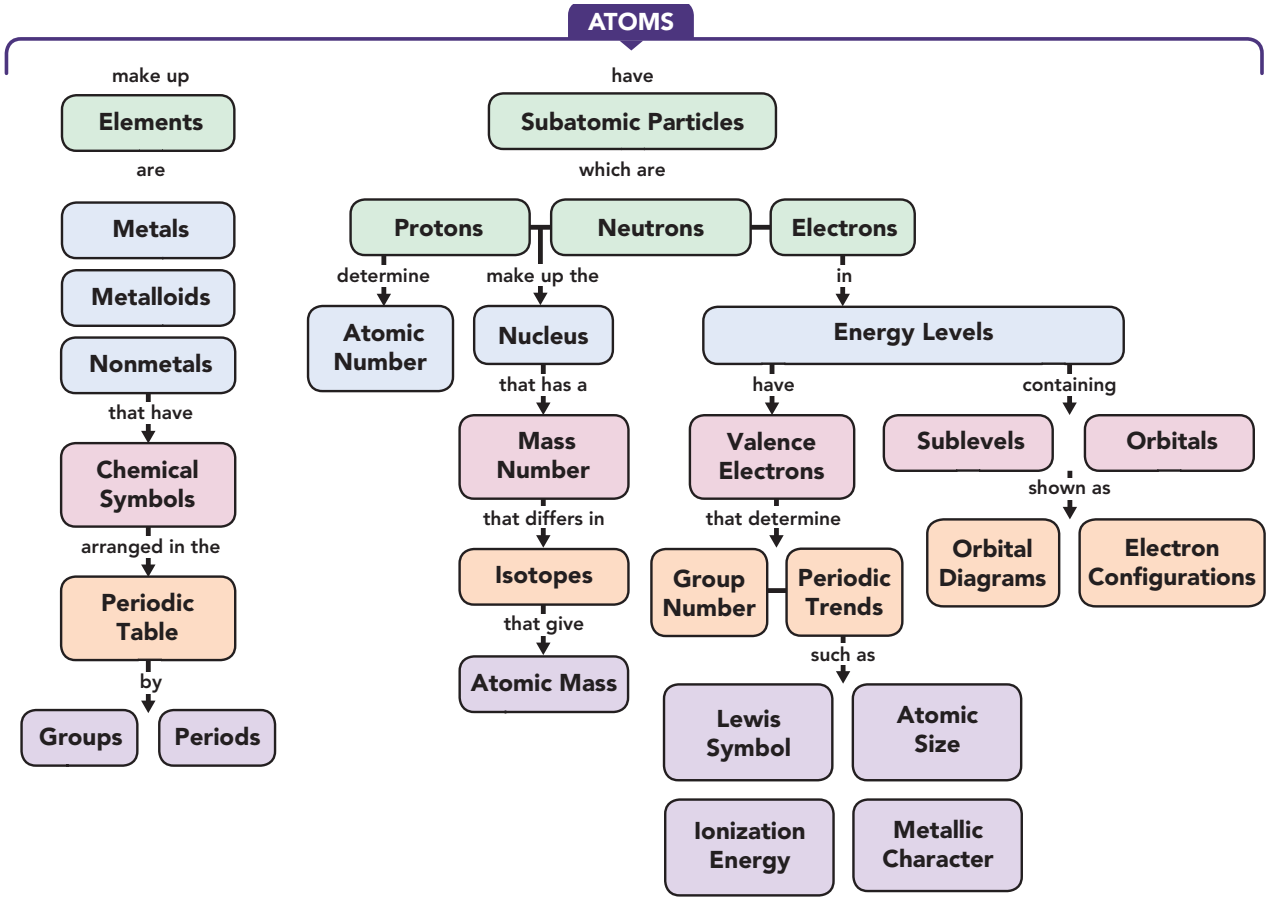
Afinidade eletrónica (cont)



- A afinidade no azoto para o eletrão e menor do que no carbono, porque a adição de um eletrão causa uma maior repulsão eletrostáticas do que a adição no carbono.

END

Resumo


ATOMS
make up
Elements
are
Metals
Metalloids
Nonmetals
that have
Chemical Symbols
arranged in the
Periodic Table
by
Groups
Periods
have
Subatomic Particles
which are
Protons
Neutrons
Electrons
determine
Atomic Number
make up the
Nucleus
that has a
Mass Number
that differs in
Isotopes
that give
Atomic Mass
in
Energy Levels
have
Valence Electrons
that determine
Group Number
Periodic Trends
such as
Lewis Symbol
Atomic Size
Ionization Energy
Metallic Character
containing
Sublevels
Orbitals
shown as
Orbital Diagrams
Electron Configurations